

ЗАНЯТИЕ 6. 11.10.02

Интерполяция и экстраполяция

1. Происхождение физических законов
2. Практическая нумерология, или физика без законов.

§1. Происхождение физических законов

1. Определение. Если значения функции $f(x)$ заданы в N точках

$$x_1 < x_2 < \dots < x_N \quad (1)$$

(известны $f(x_1), f(x_2), \dots, f(x_N)$), то *интерполяцией* называется определение значений функции $f(x)$ в любой точке, принадлежащей интервалу

$$x \in [x_1, x_N], \quad (2)$$

а *экстраполяцией* - определение значений $f(x)$ в точках, лежащих вне этого интервала.

Задачи "поляции" не имеют однозначного решения - любую конечную совокупность пар $\{x_i, f(x_i)\}$ можно связать с достаточно сложной функцией точно, притом бесконечным числом способов.

Такие задачи приобретают определенность, если ограничить класс функций. В математике чаще всего прибегают к полиномам - функциям вида

$$P_K(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_Kx^K. \quad (3)$$

По N парам можно однозначно построить полином степени $N-1$, принимающий в точках x_i значения $f(x_i)$.

Рассмотрим простейший случай - две пары. Пусть $f(x_1) = y_1$, $f(x_2) = y_2$. Представляя искомую функцию линейной: $f(x) = Ax + B$, находим:

$$A = \frac{y_1 - y_2}{x_1 - x_2}, \quad B = \frac{y_2x_1 - y_1x_2}{x_1 - x_2}. \quad (4)$$

Обобщение очевидно: у полинома $(N-1)$ -й степени имеется N подлежащих определению коэффициентов, которые могут быть определены из линейной системы N уравнений. Решения такой системы известны в общем виде и называются интерполяционной формулой Ньютона.

2. Процедура "полюции" исключительно важна в физике. Физические законы в большинстве случаев традиционно выражаются алгебраическими формулами вида

$$\alpha = f(x, y, z...). \quad (5)$$

P24. Указать альтернативные формы физических законов - привести примеры или описать воображаемые случаи.

А получаются формулы вида (5) интерполяцией данных измерений, число которых всегда конечно. В дальнейшем совокупность установленных в эксперименте значений аргументов функции f и значение α мы будем называть экспериментальной точкой, или просто точкой. Несколько примеров:

Таблица 1

автор	закон	год	число точек
Бойль	$p \sim V^{-1}$	1662	44
Кулон	$F \sim \frac{q_1 q_2}{r^2}$	1785	9
Ом	$I \sim \frac{\mathcal{E}}{r + R}$	1826	40
Джоуль Ленц	$\Delta Q \sim I^2 R \Delta t$	1841 1844	10 251

Как видно, типичное число экспериментальных точек, используемых при установлении нового физического закона - порядка десятков. Большая часть приведенных законов имеет неполиномиальный вид.

P25. Формула закона Джоуля - Ленца принадлежит к числу полиномов четвертой степени от трех переменных. Сколько коэффициентов у такого полинома общего вида?

Объяснить удачу можно только тем, что у авторов имелась предварительная гипотеза о виде зависимости, которую просто привязали к данным измерений.

Первая строка в таблице 1 датирована 1662 годом. Но, видимо, интерполяция применялась для определения физических законов задолго до того, как сложились и схема современного естествознания, и само понятие физического закона, и форма его записи (5).

Клавдий Птолемей (140 до н.э.) привел таблицу зависимости угла преломления от угла падения с восемью точками (для воды). Фейнман считает, что "данные таблицы слишком хорошо ложатся на параболу, поэтому они не могли быть результатами независимых измерений; это лишь ряд чисел, интерполированных по немногим измеренным точкам." [1] Если Фейнман прав, то Птолемей записал по менее чем 8 точкам квадратичный закон:

$$\theta_r = 0.295 + 0.799\theta_i - 0.002232\theta_i^2, \quad (6)$$

(углы θ в градусах), тогда как по современным воззрениям закон преломления имеет вид

$$\sin\theta_r = 0.752 \sin\theta_i \quad (7)$$

Заметим, что закон Снелла (7) являет редкий пример физического закона, в формулу которого входит трансцендентная функция.

3. Каково наименьшее число экспериментальных точек, использованных для установления закона? Бывало достаточно двух точек. Легенда о яблоке Ньютона связана с гипотезой о зависимости ускорения в земном поле притяжения по закону обратных квадратов:

$$g \sim \frac{1}{r^2}. \quad (8)$$

Две точки: яблоко у поверхности Земли ($R_1 = 6.4 \cdot 10^8$ см) и Луна на круговой орбите ($R_2 = 3.8 \cdot 10^{10}$ см). Есть предание, что при первом расчете, сделанном еще в 1660-е годы, Ньютон не получил приемлемого для него согласия - и только новые измерения длины дуги меридиана (а значит, R_1) подтвердили гипотезу удовлетворительно [2, с. 138-139]. Проблему можно было разрешить, немного изменив показатель степени в законе. Но тогда закон потерял бы простоту - что гораздо хуже.

Еще один пример "минималистского" установления закона по двум точкам - вывод Стефаном (1897) закона теплового излучения - обсуждался на занятии 2.

Бывало, что закон устанавливался по одной точке. Р. Майер (1842): ему принадлежит авторство части первого начала термодинамики, утверждающего, что при переводе системы между термодинамическими состояниями 1 и 2 только за счет совершения над работы A_{12} и только за счет передачи теплоты Q_{12} отношение этих количеств постоянно:

$$\frac{A_{12}}{Q_{12}} = I = \text{const}. \quad (9)$$

Есть сведения, что для определения константы I - механического эквивалента теплоты (кстати, с погрешностью всего в 15%) Майер провел только **один** опыт - считая постоянство I само собой разумеющимся.

Бывало, что закон устанавливался вообще без экспериментальных точек.

Г.С. Ом (1827) установил пропорциональность плотности тока напряженности электрического поля,

$$j = \sigma \mathcal{E}, \quad (10)$$

- то, что теперь называется "законом Ома в дифференциальной форме" - чисто умозрительно, основываясь на аналогии между потоками электричества и тепла в веществе.

Почему это возможно? Почему часто оказывается, что **простые** формулы = обладают высокой точностью;

= справедливы далеко за пределами интервала первоначальных измерений?

В установлении законов велика роль везения. Сошлемся на авторитет Энрико Ферми:

"Теоретические исследования можно вести двумя путями.

1) Собирают экспериментальные данные, изучают их, выдвигают гипотезу, предсказывают и проверяют результаты.

2) Угадывают; если природа добра, а угадывающий умен, можно добиться успеха." [3, с. 504]

В настоящее время подавляющее большинство экспериментальных исследований в физике ведется в областях, где основные законы уже установлены. Вновь установленные зависимости вида (5), описывающие связь между данными измерений, называют не "законами природы", а "эмпирическими формулами". Они считаются полуфабрикатами, ставящими перед теорией задачу обоснования из известных основных законов.

§2. Практическая нумерология, или физика без законов.

1. Существует специальный класс моделей, в которых из набора точек выводятся лишь одно - два числа, представляющие особый интерес для планирования эксперимента или для дальнейшего развития теории. При этом не ставится задача установления общего закона: сама формула закона (5) имеет сугубо вспомогательный характер, а порой и вовсе остается неизвестной.

Такую форму можно назвать практической нумерологией. По словарному определению¹, нумерология есть изучение оккультного значения чисел. А оккультное, по тому же словарю, есть скрытое, секретное, тайное.

Рассмотрим пять примеров практической нумерологии, взяв их в хронологической последовательности.

★01. ПЛОТНОСТЬ ЗЕМЛИ ПО НЬЮТОНУ (1687).

Обычно считают (говорят и пишут), что закон всемирного тяготения был известен Ньютону лишь в форме закона подобия

$$F \sim \frac{m_1 m_2}{r^2}, \quad (11)$$

а коэффициент пропорциональности G - гравитационная постоянная - был определен позже. Для определения G надо измерить силу между (точечными - или сферическими) телами известной массы. Поскольку ускорение свободного падения g всегда чувствуется и легко измеримо, а радиус Земли R_T известен, определение G позволяет найти массу Земли M_T и часто называется взвешиванием Земли. С другой стороны, оценка средней плотности Земли ρ_T позволяет определить M_T и G . Ньютон дал такую оценку (1687):

"Так как обыкновенные верхние части Земли, примерно, вдвое плотнее воды, немного же ниже, в рудниках, оказываются, примерно, втрое, вчетверо и даже в 5 раз более тяжелыми, правдоподобно, что все количество вещества Земли приблизительно в 5 или 6 раз больше того, как если бы оно все состояло из воды." [4, с. 525]

По современным данным $\bar{\rho} = 5.517 \text{ г см}^{-3}$. Комментатор пишет: "Таким образом, догадка Ньютона оправдалась вполне и считается одним из наиболее поразительных проявлений его гениальной проницательности."

Первые экспериментальные определения G , а значит и $\bar{\rho}$, дали значения $\bar{\rho} \approx 6.2$ ($\delta = 12\%$) (Н. Маскелайн, 1776) и $\bar{\rho} \approx 5.5$ ($\delta = 1.2\%$) (Г. Кавендиш, 1798). ■

¹ **Numerology** n [L numerus + E -o- + -logy] (1911): the study of the occult significance of numbers. **Occult** adj [L occultus, fr. pp. of occulere to cover up, fr. ob- in the way + -culere (akin to celare to conceal)--more at ob-, hell] (1567) 1: not revealed: secret 2: not easily apprehended or understood: abstruse, mysterious. *Merriam - Webster's College Dictionary*

P26. Гипотезы о распределении плотности вещества Земли выдвигались задолго до Ньютона. В первой части своей "Божественной комедии" (написана между 1308 и 1321) Данте Алигьери описывает свое путешествие через центр Земли. Автор нигде не отмечает изменений силы тяжести: $g(r) = \text{const.}$ Найти дантов закон распределения плотности $\rho(r)$ и выразить среднюю плотность Земли $\bar{\rho}$ через плотность поверхностных слоев ρ_0 .

★02. ЗАКОН БОДЕ - ТИЦИУСА И ОТКРЫТИЕ АСТЕРОИДОВ (1772).

Нумерология недалеко от астрологии: идея постижения гармонии сфер - обнаружения простых закономерностей в движении планет - видимо, принадлежит к древнейшим. Из идей нового времени отметим гипотезу Кеплера, видевшего связь последовательности радиусов орбит планет со свойствами совершенных многогранников. К интересным предсказаниям схема не привела.

Во второй половине XVIII века Иоганн Даниэль Тициус (1729-1796) предложил эмпирическую формулу для больших полусей орбит планет

$$a_n = 0.3 \cdot 2^{n-2} + a_1 \quad (12)$$

($n \geq 2, n \geq 2$; длины здесь и далее - в астрономических единицах).

"Тициус опубликовал свой закон в примечании к книге, которую он переводил. На этот закон никто не обращал внимания до тех пор, пока Боде {Иоганн Боде, 1747-1826} случайно не обнаружил его и не опубликовал в 1772 г." [5, с. 383]

Табл. 2

№	Планета	a по Б-Т	a набл.	δ , %
1	Меркурий	0.4	0.39	2.5
2	Венера	0.7	0.72	2.8
3	Земля	1.0	1	0
4	Марс	1.6	1.52	5.2
5		2.8		
6	Юпитер	5.2	5.20	0
7	Сатурн	10.0	9.54	4.8
8	Уран	19.6	19.19	2.1
9	Нептун	38.8	30.07	
10	Плутон	77.2	39.52	

Сравнивая данные для формулы Б-Т и наблюдаемые значения для шести известных в то время больших планет, Боде выдвинул гипотезу о существовании планеты между Марсом и Юпитером. Дополнительным аргументом в пользу закона Б-Т послужило то, что Уран - открытый Гершелем в 1781 г. - соответствовал закону с погрешностью $\delta = 2.1\%$, примерно такой же, как для внутренних планет.

Франц Цах (1754-1832) в 1796 г. предложил организовать систематический поиск промежуточной планеты. Вскоре последовало открытие - Джузеппе Пиацини (1746-1826) открыл 01.01.1801 и наблюдал до середины февраля планету Цереру, для которой наблюдаемое $a = 2.767$ согласовалось с теоретическим $a_5 = 2.8$ с точностью $\delta = 1.2\%$.

Генрих Ольберс (1758-1840) 08.03.1802 открыл Палладу ($a = 2.770$). Близость орбит Цереры и Паллады послужили основанием для гипотезы (Ольберс) о том, что обе планеты являются частями одного небесного тела. Поиск в точке пересечения орбит Цереры и Паллады привел к открытию Юноны (К. Гардинг, 01.09.1804, $a = 2.668$) и Весты (Г. Ольберс, 04.03.1807, $a = 2.362$) [6, с. 57-61].

Теперь о самом законе:

1) Для самых внешних планет он не выполняется: для Нептуна $\delta = 22\%$, а для Плутона даже $\delta = 49\%$.

2) При обнаружении астероидов предварительное знание расстояния до них не играло определяющей роли: нужно знать угловые координаты небесного тела.

3) Причины, приводящие к такому закону распределения расстояний, неизвестны. Неоднократно предпринимались попытки обосновать закон Б-Т - но компьютерные моделирование динамики образования Солнечной системы показывает, что распределение и масс планет, и радиусов их орбит могло бы быть совсем иным.

4) И все же для крупнейших астероидов закон Б-Т хорошо выполняется. ■

★03. АБСОЛЮТНЫЙ НОЛЬ ТЕМПЕРАТУРЫ ПО ГЕЙ-ЛЮССАКУ (1802).

Гей-Люссак в 1802 году установил, что коэффициенты теплового расширения в диапазоне температур от $0\text{ }^{\circ}\text{C}$ до $100\text{ }^{\circ}\text{C}$ для воздуха, водорода, кислорода и азота имеют одно и то же значение $\alpha = 3.750 \cdot 10^{-3} \text{ град}^{-1}$ с точностью не хуже $\delta = 2.6 \cdot 10^{-3}$. Результаты своих измерений Гей - Люссак обобщил так:

"Все газы вообще, насколько я могу заключить, при одинаковом давлении расширяются от теплоты одинаковым образом."

Из найденного закона $V = V_0[1 + \alpha t]$ Гей-Люссак заключил о существовании предельной степени холода (при которой объем газа будет нулевым): $t_{AZ} = -266^\circ\text{C}$, что имеет точность $\delta = 2.5\%$. То, что при приближении к абсолютному нулю вещество приобретет неограниченно большую плотность и вряд ли сможет оставаться газообразным и даже жидким, его не волновало. ■

P27. Оценить температуру абсолютного нуля, исходя из значений коэффициентов теплового расширения (при комнатной температуре) жидкостей и твердых тел.

★04. ТАБЛИЦА МЕНДЕЛЕЕВА И СВОЙСТВА ГАЛЛИЯ (1875).

Первый вариант периодической системы элементов был создан Д.И. Менделеевым в 1869 г. В 1871 г. в статье "Естественная система элементов и ее применение к указанию свойств неоткрытых элементов" (ЖРХО, 1871, 3, 2, 25) предсказал свойства экабора, экаалюминия и экасилиция.

В 1875 г. П. Лекок де Буабодран сообщил об открытии нового элемента галлия с плотностью $\rho = 4.7 \text{ г см}^{-3}$ (Compt. Rend., 1875, 81, 493). Сразу же Д.И. Менделеев указал на тождество галлия с экаалюминием - и указал, что правильное значение плотности должно быть $\rho = 5.9 \text{ г см}^{-3}$ (Compt. Rend., 1875, 81, 969). Уточненные измерения ЛдБ (Compt. Rend., 1876, 83, 611) дали для ρ значение, близкое к предсказанному, что было триумфом теории Менделеева. [7 - с. 129-130] Ныне принято значение плотности галлия $\rho = 5.91 \text{ г см}^{-3}$ - точность прогноза $\delta = 0.2\%$.

Метод предсказания: для параметров, характеризующих элемент X , Менделеев пользовался интерполяционной формулой

$$X = \frac{1}{4}(A + B + C + D), \quad (13)$$

где A, B, C и D - характеристики элементов, соседствующих с X в периодической таблице.

	B	
A	X	C
	D	

Тем самым в эксперименте проверяется правильность интерполяционной формулы (13).

Doverguay, по roverguay: повторим расчет. Трудность в том, что элемент С, ныне называемый германием, ко времени дискуссии еще не был известен: он открыт К. Винклером в 1885 г. Принимая схему Менделеева для более широкого куска таблицы, показанного на рисунке,

	B	C	
A	X	Y	D
	F	E	

получаем систему двух линейных уравнений

$$X - \frac{1}{4}Y = \frac{1}{4}(A + B + F), \quad (14)$$

$$Y - \frac{1}{4}X = \frac{1}{4}(C + D + E), \quad (15)$$

решая которые с использованием современных нам экспериментальных данных, находим

	ρ интерп	ρ экспер
Ga	5.60	5.91
Ge	5.23	5.32

Точность сама по себе хорошая - $\delta = 5.5\%$ - но гораздо хуже заявленной.

Откуда Менделеев получил свое число 5.9? Из-за неточности известных ему данных?

Теперь о самом результате.

1) Схема интерполяции (13) не очень надежна - расчет для Са дает $\rho = 4.21 \text{ гсм}^{-3}$, в то время как измеренное значение $\rho = 5.58 \text{ гсм}^{-3}$ - точность $\delta = 25\%$.

2) Посмотрим на поставленную задачу с точки зрения современной физики. Для того, чтобы ответить на вопрос: "Какова плотность основной фазы элемента #31?" с менделеевской точностью - нужно уметь вычислять:

= массу ядер - а значит, использовать теорию ядерных сил. Результатами будут массы стабильных изотопов.

= изотопный состав: стабильные изотопы галлия - $A=69$ (60%) и $A=71$ (40%). В зависимости от степени их относительной распространенности значение ρ может измениться более чем на 3% - а это в 15 раз больше погрешности Менделеева. Значит, нужно привлекать теорию происхождения элементов.

= электронную структуру атомов - т.к. теория кристаллического состояния вещества использует в качестве исходного материала сведения о структуре ионного остова и волновых функций электронов внешней оболочки.

= электронную структуру кристалла - которая определяет тип решетки и ее параметры; эти величины довольно чувствительны к тонким деталям электронной структуры атома. Так, галлий и его ближайшие соседи в таблице Менделеева в основной фазе все имеют разные типы решеток:

	Al - ГЦК	
Zn - Гек	Ga - Ром	Ge - Алм
	In - Тет	

РЕЗЮМЕ: только использование комплекса современных теорий (основанных на первых принципах) с применением лучших расчетных методов может обеспечить достижение точности предсказаний Менделеева. ■

★05. СПЕКТРАЛЬНЫЕ СЕРИИ АТОМА ВОДОРОДА ПО БАЛЬМЕРУ (1885).

Иоганн Якоб Бальмер - школьный учитель из Базеля и любитель нумерологии (интересовался, в частности, числом ступенек пирамид) [8, с.74] заметил, что длины волн некоторых линий в спектре излучения водорода могут быть описаны формулой

$$\lambda = h \frac{m^2}{m^2 - 2^2} \quad (15)$$

для $m = 3, 4, 5$ и 6 . Из этой формулы он вывел предсказание 5-й линии и существование красного края серии. Объяснение формулы Бальмера и ее аналогов для других серий (Ридберг, 1890) было даже не успехом, а ключевым звеном при построении квантовой теории Бора (1913).

"Как только я увидел формулу Бальмера - часто повторял Бор - для меня сразу все стало ясно." [8, с.86]

Формула Бальмера справедлива с точностью $\delta \approx 10^{-4}$. ■

Q1> Какой пример может быть выделен из группы приведенных пяти как лишней?

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике. В 9-ти тт. Т. 3 - М., Мир. 1965 - 240 с. - с. 8.
- [2] Вавилов С.И. Исаак Ньютон. - М.-Л.: Изд-во АН СССР, 1945. - 232 с.
- [3] Ферми Э. Научные труды. - т. 2. - М.: Наука, 1972. - 712 с.
- [4] Ньютон И. Математические начала натуральной философии. - М.: Наука, 1989. - 15+VI+687 с.
- [5] Паннекук А. История астрономии. - М.: Наука, 1966. - 592 с.
- [6] Гребенников Е.А., Рябов Ю.А. Поиски и открытия планет. - М.: Наука, 1984. - 224 с.
- [7] Кедров Б.М., Трифонов Д.Н. Закон периодичности и химические элементы. Открытия и хронология. - М.: Наука, 1969. - 194 с.
- [8] Джеммер М. Эволюция понятий квантовой механики. - М.: Наука, 1985. - 334 с. - с. 18.

