Модуль 14.1. Вариационно-проекционные методы решения краевых задач (примеры применения методов)

Сведение краевых задач к задачам с однородными граничными условиями

Вариационно-проекционные численные методы, рассмотренные в этом модуле, предназначены для решения **широкого класса линейных дифференциальных уравнений с линейными однородными граничными условиями**.

Указанные методы используются также для решения **нелинейных дифференциальных уравнений**, существенно, чтобы **граничные условия были линейными и однородными**.

Основные принципы вариационно-проекционных методов обычно рассматривают на примере краевых задач для линейных обыкновенных дифференциальных уравнений 2-го порядка.

Поэтому именно на таком примере покажем, как дифференциальное уравнение с **линейными неоднородными граничными условиями** свести к дифференциальному уравнению с **линейными однородными граничными условиями**.

Пусть $w(x)$ при $x \in [0;1]$ – искомое решение линейного дифференциального уравнения 2-го порядка с линейными неоднородными граничными условиями:

$$\begin{cases} w'' + x\,w' + w = -5x^2 \\ w(0) = 1,\ w(1) = 0 \end{cases} \qquad (14.1)$$

Решение задачи (14.1) ищем в виде

$$w(x) = u(x) + \eta(x).$$

Функцию $\eta(x)$ подбираем так, чтобы для нее выполнялись условия, указанные в (14.1):

$$\eta(0) = 1,\ \ \eta(1) = 0.$$

В качестве такой функции можно выбрать, например, $\eta(x) = 1 - x^2$.

Тогда решение задачи (14.1) , то есть функцию $w(x)$, запишем в виде

$$w(x) = u(x) + 1 - x^2. \qquad (14.2)$$

Подставим (14.2) в (14.1):

$$\begin{cases} u'' + (1-x^2)'' + x\cdot u' + x\cdot(1-x^2)' + u + (1-x^2) = -5x^2 \\ u(0) + 1 = 1,\ \ u(1) + 0 = 0 \end{cases}$$

Перепишем задачу:

$$\begin{cases} u'' + x\cdot u' + u + \{-2 - 2x^2 + 1 - x^2\} = -5x^2 \\ u(0) = 0,\ \ u(1) = 0 \end{cases}$$

Для неизвестной функции $u(x)$, $x \in [0;1]$, получим линейное дифференциальное уравнение 2-го порядка с линейными однородными граничными условиями:

$$\begin{cases} u'' + x\,u' + u = 1 - 2x^2 \\ u(0) = 0, u(1) = 0 \end{cases} \qquad (14.3)$$

После того, как решение (14.3) будет получено, решение (14.1) запишем в виде

$$w(x) = u(x) + 1 - x^2$$

Таким образом, за счет выбора функции, удовлетворяющей неоднородным граничным условиям, дифференциальную задачу с линейными **неоднородными** граничными условиями сводим к задаче с линейными **однородными** граничными условиями.

Метод Бубнова-Галеркина

Пусть H и K – гильбертовы пространства, такие, что $K \subset H$.

Пусть L – линейный дифференциальный оператор,

который действует из пространства K в пространство H.

Рассмотрим линейное дифференциальное уравнение общего вида

$$Lu = f \qquad (14.4)$$

Правая часть уравнения задана и является элементом пространства H: $f \in H$.

Решение уравнения ищем в пространстве K: $u \in K \subset H$.

Дополним задачу линейными однородными граничными условиями,

которые в общем случае запишем как

$$lu = 0. \qquad (14.5)$$

Через l обозначен линейный (в общем случае дифференциальный) оператор, «отвечающий» за граничные условия.

Далее рассмотрим **краевую задачу**: **линейное дифференциальное уравнение** (14.4) с **линейными однородными граничными условиями** (14.5):

$$\begin{cases} Lu = f \\ lu = 0 \end{cases} \qquad (14.6)$$

Метод приближенного решения задач класса (14.6), предложенный Бубновым и Галёркиным, состоит в следующем.

В бесконечномерном гильбертовом пространстве K выбирают конечное число линейно независимых функций $\varphi_i \in K, i = 1,\ldots n$, каждая из которых соответствует линейным однородным граничным условиям задачи:

$$l\varphi_i = 0, i = 1,\ldots n. \qquad (14.7)$$

Эти функции используются как базис для построения конечномерного подпространства K_n (оно имеет размерность n):

$$K_n = \{\sum_{i=1}^{n} \alpha_i \varphi_i \mid \alpha_i \in R, \varphi_i \in K, l\varphi_i = 0, i = 1,\dots n\} \quad (14.8)$$

Такое подпространство вложено и в пространство K, и в пространство H:

$$K_n \subset K \subset H$$

Запись (14.8) означает, что каждый элемент подпространства K_n может быть представлен линейной комбинацией базисных функций:

если $\varphi \in K_n$, то существует такой набор коэффициентов $\alpha_i, i = 1,\dots n$, что

$$\varphi = \alpha_1\varphi_1 + \alpha_2\varphi_2 + \dots + \alpha_n\varphi_n.$$

Утверждение 1. Все элементы подпространства K_n соответствуют граничным условиям задачи (14.6): если $\varphi \in K_n$,

$$l\varphi = 0 \quad (14.9)$$

Свойство (14.9) вытекает из того, что граничные условия линейны и однородны:

$$l\varphi = l\ \underbrace{[\alpha_1\varphi_1 + \alpha_2\varphi_2 + \dots + \alpha_n\varphi_n]}_{\substack{\text{линейный оператор} \\ \text{применили к линейной} \\ \text{комбинации элементов}}} = \underbrace{\alpha_1 [l\varphi_1] + \alpha_2 [l\varphi_2] + \dots + \alpha_n [l\varphi_n]}_{\substack{\text{получили линейную комбинацию} \\ \text{результатов применения оператора} \\ \text{к каждому из элементов}}} = 0$$

Приближенное решение задачи (14.6) **будет найдено как элемент** K_n.

Обозначим его через v **и запишем в виде**

$$v = \alpha_1\varphi_1 + \alpha_2\varphi_2 + \dots + \alpha_n\varphi_n \quad (14.10)$$

Очевидно, что v **соответствует граничным условиям** (14.6):

$$lv = \alpha_1 [l\varphi_1] + \alpha_2 [l\varphi_2] + \dots + \alpha_n [l\varphi_n] = 0 \quad (14.11)$$

Определение 1. **Невязкой дифференциального уравнения** (14.4) **на приближенном решении** v называется выражение

$$Lv - f \quad (14.12)$$

Принцип Бубнова-Галеркина состоит в следующем:

Определение 2. Приближенное решение v задачи (14.6), найденное в классе K_n методом Бубнова-Галеркина, должно обеспечить **ортогональность невязки всем базисным функциям**.

$$(Lv - f, \varphi_i)_H = 0, i = 1,\dots n \quad (14.13)$$

Здесь символом $(*\cdot,*)_H$ обозначено скалярное произведение в гильбертовом пространстве H.

Утверждение 2. В соответствии с методом Бубнова-Галеркина коэффициенты $\alpha_i, i=1,...n$, определяющие приближенное решение v как элемент конечномерного подпространства K_n по формуле (14.10), следует искать как решение СЛАУ

$$\begin{bmatrix} (L\varphi_1,\varphi_1)_H & (L\varphi_2,\varphi_1)_H & \dots & (L\varphi_n,\varphi_1)_H \\ (L\varphi_1,\varphi_2)_H & (L\varphi_2,\varphi_2)_H & \dots & (L\varphi_n,\varphi_2)H \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ (L\varphi_1,\varphi_n)_H & (L\varphi_2,\varphi_n)_H & \dots & (L\varphi_n,\varphi_n)_H \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \dots \\ \alpha_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (f,\varphi_1)_H \\ (f,\varphi_2)_H \\ \dots \\ (f,\varphi_n)_H \end{bmatrix} \qquad (14.14)$$

Доказательство

Запишем невязку дифференциального уравнения (14.4) на приближенном решении v по определению, подставим решение v в виде (14.10) и воспользуемся свойством линейности дифференциального оператора L:

$$Lv - f = \underbrace{L\,[\sum_{i=1}^{n}\alpha_i\varphi_i\,] - f = \sum_{i=1}^{n}\alpha_i\,[L\varphi_i\,] - f}_{\substack{\text{линейный оператор применили к} \\ \text{линейной комбинации элементов и} \\ \text{получили линейную комбинацию} \\ \text{результатов применения оператора} \\ \text{к каждому из элементов}}} \qquad (14.15)$$

Таким образом, невязка на приближенном решении v записана через коэффициенты $\alpha_i, i=1,...n$.

Подставим (14.15) в формулы (14.13) – условия ортогональности невязки всем базисным функциям:

$$(Lv - f,\varphi_i)_H = (\sum_{j=1}^{n}\alpha_j[L\varphi_j] - f,\varphi_i)_H = 0, \quad i=1,...n \qquad (14.16)$$

Уравнения (14.16) можно записывать как разности двух скалярных произведений, и каждая разность должна быть равна нулю:

$$(\sum_{j=1}^{n}\alpha_j[L\varphi_j],\varphi_i)_H - (f,\varphi_i)_H = 0, \quad i=1,...n \qquad (14.17)$$

В каждом из уравнений (14.17) приравниваем скалярные произведения:

$$(\sum_{j=1}^{n}\alpha_j[L\varphi_j],\varphi_i)_H = (f,\varphi_i)_H, \quad i=1,...n \qquad (14.18)$$

Далее используем их **линейные свойства**.

Сначала из-под знака скалярного произведения выносим знак суммирования:

$$\sum_{j=1}^{n}(\alpha_j[L\varphi_j],\varphi_i)_H=(f,\varphi_i)_H, \quad i=1,\dots n \qquad (14.19)$$

Затем из-под знаков скалярных произведений выносим коэффициенты $\alpha_i, i=1,\dots n$:

$$\sum_{j=1}^{n}\alpha_j(L\varphi_j,\varphi_i)_H=(f,\varphi_i)_H, i=1,\dots n \qquad (14.20)$$

Система уравнений (14.20) представляет собой СЛАУ с **неизвестными** $\alpha_i, i=1,\dots n$. Если СЛАУ записать в векторном виде, получим (14.14).

Комментарии

Идея метода такова: в гильбертовых пространствах H и K есть бесконечномерные базисы. **Функция «тождественный ноль» ортогональна всем базисным функциям.**

Если бы удалось найти u – точное решение задачи (14.6), то невязка на данном решении, то есть $Lu-f$, была бы «тождественный ноль».

Невязка на точном решении, то есть $Lu-f$, **ортогональна всем элементам бесконечномерного базиса:**

$(Lu-f,\hat{\varphi}_i)_H=0, i=1,2,\dots$, где $\hat{\varphi}_i, i=1,2,\dots,$ – базис в H.

Так как нет универсального способа решить систему уравнений бесконечной размерности, выбираем конечномерное подпространство $K_n\subset K\subset H$ с конечным базисом.

Требуем, чтобы невязка на приближенном решении, то есть $Lv-f$, где $v\in K_n$ – приближенное решение, **была ортогональна всем элементам конечномерного базиса в** K_n:

$(Lv-f,\varphi_i)_H=0, i=1,\dots n$, где $\varphi_i, i=1,\dots n$ – базис в K_n.

Чтобы повысить точность решения, нужно увеличить размерность подпространства K_n или изменить набор базисных функций.

В тот период, когда метод разрабатывался (первая половина XX столетия), в качестве базисных функций использовались **тригонометрические функции** и **полиномы**.

Современные проекционные методы – в частности, **метод конечных элементов** (МКЭ), развивают предложенный подход.

В определенном смысле МКЭ – это метод Бубнова-Галеркина, в котором **в качестве базиса конечномерного подпространства используются сеточные функции с компактным носителем**. Такие функции отличны от нуля в небольшом числе узлов сетки и равны нулю в большинстве узлов сетки.

Чем гуще сетка, тем больше базисных функций и больше неизвестных коэффициентов. Поэтому для отыскания коэффициентов $\alpha_i, i=1,...n$ нужно решить СЛАУ большой размерности.

В силу того, каждая базисная функция отлична от нуля на небольшом участке сетки, матрица СЛАУ для МКЭ является разреженной.

Поэтому такие СЛАУ решают **итерационными методами линейной алгебры**.

Метод коллокации

Данный метод отличается от предыдущего метода **принципом подбора приближенного решения v в подпространстве K_n**.

Как и в предыдущем случае, приближенное решение задачи (14.6) будет найдено в виде линейной комбинации базисных функций:

$$v = \alpha_1\varphi_1 + \alpha_2\varphi_2 + ... + \alpha_n\varphi_n \qquad (14.21)$$

Соответствие базисных функций граничным условиям (14.6): $l\varphi_i = 0, i=1,...n$, обеспечивает точное соответствие приближенного решения v граничным условиям данной задачи: $lv = \alpha_1[l\varphi_1] + \alpha_2[l\varphi_2] + ... + \alpha_n[l\varphi_n] = 0$.

Чтобы найти v, в области определения искомого решения выбирают систему точек коллокации. Количество таких точек должно совпадать с размерностью подпространства K_n. Обозначим их через $x_j, j=1,...n$.

Определение 3. **Метод коллокации** состоит в следующем: приближенное решение v, найденное в классе K_n, должно обеспечить **нулевую невязку дифференциального уравнения на системе точек коллокации**:

$$Lv - f = 0 \text{ для всех } x_j, j=1,...n \qquad (14.22)$$

Утверждение 3. В соответствии с методом коллокации коэффициенты $\alpha_i, i=1,...n$, определяющие приближенное решение v как элемент конечномерного подпространства K_n по формуле (14.21), следует искать как решение СЛАУ

$$\begin{bmatrix} L\varphi_1|_{x=x_1} & L\varphi_2|_{x=x_1} & \dots & L\varphi_n|_{x=x_1} \\ L\varphi_1|_{x=x_2} & L\varphi_2)|_{x=x_2} & \dots & L\varphi_n|_{x=x_2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ L\varphi_1|_{x=x_n} & L\varphi_2)|_{x=x_n} & \dots & L\varphi_n|_{x=x_n} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \dots \\ \alpha_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f|_{x=x_1} \\ f|_{x=x_2} \\ \dots \\ f|_{x=x_n} \end{bmatrix} \qquad (14.23)$$

Доказательство

Подставим приближенное решение v в виде (14.21) в уравнения (4.22):

$$L[\sum_{i=1}^{n}\alpha_i\varphi_i] - f = 0 \text{ для всех } x_j, j=1,...n \qquad (14.24)$$

Выносим знак суммирования из-под знака линейного оператора:

$$\sum_{i=1}^{n} L[\alpha_i \ \varphi_i] - f = 0 \text{ для всех } x_j, j = 1,...n \tag{14.25}$$

Затем из-под знака линейного оператора выносим коэффициенты $\alpha_i, i = 1,...n$:

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i \ [L\varphi_i] - f = 0 \text{ для всех } x_j, j = 1,...n \tag{14.26}$$

Система уравнений (14.26) представляет собой СЛАУ с **неизвестными** $\alpha_i, i = 1,...n$. Если СЛАУ записать в векторном виде, получим (14.23).

Метод наименьших квадратов (для решения дифференциальных уравнений)

Рассмотрим еще один метод выбора приближенного решения v в подпространстве K_n. Этот **метод наименьших квадратов** (МНК).

В связи с тем, что МНК используется не только для приближенного решения дифференциальных уравнений, но также для приближения функций и обработки экспериментальных данных, в названии раздела (в скобках) уточнено назначение метода.

Как и в предыдущих случаях, приближенное решение v будет найдено в подпространстве K_n. в виде линейной комбинации базисных функций:

$$v = \alpha_1\varphi_1 + \alpha_2\varphi_2 + ... + \alpha_n\varphi_n \tag{14.27}$$

За счет соответствия базисных функций граничным условиям задачи (14.6) **гарантировано точное соответствие v граничным условиям данной задачи.**

Определение 4. **Метод наименьших квадратов** (для решения дифференциальных уравнений) состоит в следующем: приближенное решение v, найденное в подпространстве K_n, должно обеспечить **минимально возможную невязку дифференциального уравнения (14.6) в норме гильбертова пространства H в подпространстве K_n** :

$$\| Lv - f \|_H \underset{v \in K_n}{\to} \min \tag{14.28}$$

Минимизация функционала осуществляется по всем элементам v, принадлежащим конечномерному подпространству K_n.

Утверждение 4. Пусть базисные функции $\varphi_i \in K, i = 1,...n$ подпространства K_n, выбраны так, что элементы $L\varphi_i \in H, i = 1,...n$, линейно независимы. Тогда приближенное решение задачи (14.6), обеспечивающее в классе K_n минимальную невязку (14.28), существует и единственно, а коэффициенты $\alpha_i, i=1,\ldots n$ разложения v по базисным функциям $\varphi_i \in K, i=1,\ldots n$ являются решением СЛАУ

$$\begin{bmatrix} (L\varphi_1, L\varphi_1)_H & (L\varphi_1, L\varphi_2)_H & \ldots & (L\varphi_1, L\varphi_n)_H \\ (L\varphi_2, L\varphi_1)_H & (L\varphi_2, L\varphi_2)_H & \ldots & (L\varphi_2, L\varphi_n)_H \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ (L\varphi_n, L\varphi_1)_H & (L\varphi_n, L\varphi_2)_H & \ldots & (L\varphi_n, L\varphi_n)_H \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \ldots \\ \alpha_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (L\varphi_1, f)_H \\ (L\varphi_2, f)_H \\ \ldots \\ (L\varphi_n, f)_H \end{bmatrix} \qquad (14.29)$$

СЛАУ (14.29) называют **нормальной системой уравнений**.

Здесь символом $(*\cdot,*)_H$ обозначено скалярное произведение в гильбертовом пространстве H.

Доказательство

Заменим задачу (14.28) о минимизации нормы невязки на эквивалентную задачу минимизации квадрата нормы невязки:

$$\| Lv - f \|_H^2 = (Lv - f, Lv - f)_H \to \min \qquad (14.30)$$

Так как минимизация проводится по элементам из K_n и все элементы K_n записываются в виде (14.27), функционал задачи следует рассматривать как зависящий от параметров $\alpha_i, i=1,\ldots n$.

Функционал (14.30) обозначим $S(\alpha_1,\alpha_2,\ldots\alpha_n)$. Тогда (14.30) записывается в виде

$$S(\alpha_1,\alpha_2,\ldots\alpha_n) \underset{\alpha\in R^n}{\to} \min. \qquad (14.31)$$

Точки, подозрительные на экстремум, находим из условий

$$\frac{\partial S}{\partial \alpha_i} = 0, i=1,\ldots n \qquad (14.32)$$

Систему уравнений (14.32) называют **нормальной системой уравнений**.

Этапы доказательства Утверждения 4 состоят в следующем:

1) линейная независимость элементов $L\varphi_i \in H, i=1,\ldots n$ обеспечивает существование и единственность решения нормальной системы уравнений (14.32)

2) в силу линейной независимости элементов $L\varphi_i \in H, i=1,\ldots n$, единственное решение системы (14.32) является точкой локального минимума

3) в силу свойств функционала $S(\alpha_1,\alpha_2,\ldots\alpha_n)$. локальный минимум является глобальным.

Пройдем перечисленные этапы.

Шаг I

Выясним, как выглядит $S(\alpha_1,\alpha_2,...\alpha_n)$. Для этого в функционал задачи (14.30) подставим формулу (14.27):

$$S(\alpha_1,\alpha_2,...\alpha_n)=(Lv-f,Lv-f)_H=$$
$$=(L\ [\sum_{i=1}^{n}\alpha_i\varphi_i]-f,\quad L\ [\sum_{j=1}^{n}\alpha_j\varphi_j]-f)_H \qquad (14.33)$$

Затем используем **линейные свойства дифференциального оператора**: вынесем знак суммирования из-под знака оператора и вынесем из-под знака оператора коэффициенты $\alpha_i, i=1,...n$

$$(L[\sum_{i=1}^{n}\alpha_i\varphi_i]-f,\quad L[\sum_{j=1}^{n}\alpha_j\varphi_j]-f)_H=$$

$$=(\sum_{i=1}^{n}\alpha_i[L\varphi_i]-f,\sum_{j=1}^{n}\alpha_j[L\varphi_j]-f)_H$$

Раскрывая скалярное произведение, получим

$$(f,f)_H+(\sum_{i=1}^{n}\alpha_i[L\varphi_i],\sum_{j=1}^{n}\alpha_j[L\varphi_j])_H-2(\sum_{i=1}^{n}\alpha_i[L\varphi_i],f)_H$$

Далее используем **линейные свойства скалярного произведения**: сначала из-под знаков скалярных произведений выносим знаки суммирования

$$(f,f)_H-2\sum_{i=1}^{n}(\alpha_i[L\varphi_i],f)_H+\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}(\alpha_i[L\varphi_i],\alpha_j[L\varphi_j])_H$$

Затем за скобками скалярных произведений должны оказаться числовые коэффициенты $\alpha_i, i=1,...n$

$$(f,f)_H-2\sum_{i=1}^{n}\alpha_i(L\varphi_i,f)_H+\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\alpha_i\,\alpha_j(L\varphi_i,L\varphi_j)_H$$

Таким образом, показано, что функционал $S(\alpha_1,\alpha_2,...\alpha_n)$ является квадратичной функцией относительно своих аргументов $\alpha_i, i=1,...n$:

$$S(\alpha_1,\alpha_2,...\alpha_n)=$$
$$=(f,f)_H-2\sum_{i=1}^{n}\alpha_i(L\varphi_i,f)_H+\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\alpha_i\,\alpha_j(L\varphi_i,L\varphi_j)_H \qquad (14.34)$$

Шаг II

Исследуем нормальную систему уравнений (14.32):

$$\frac{\partial S}{\partial\alpha_i}=0, i=1,...n$$

Ее решения являются точками, подозрительными на экстремум.

Используя формулу (14.34), запишем частные производные функционала $S(\alpha_1, \alpha_2, ...\alpha_n)$:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial S}{\partial \alpha_1} = -2(L\varphi_1, f)_H + 2\alpha_1 (L\varphi_1, L\varphi_1)_H + 2\sum\limits_{j=2}^{n} \alpha_j (L\varphi_1, L\varphi_j)_H \\ \dfrac{\partial S}{\partial \alpha_2} = -2(L\varphi_2, f)_H + 2\alpha_2 (L\varphi_2, L\varphi_2)_H + 2\sum\limits_{j=1\, j\neq 2}^{n} \alpha_j (L\varphi_2, L\varphi_j)_H \\ ... \\ \dfrac{\partial S}{\partial \alpha_n} = -2(L\varphi_n, f)_H + 2\alpha_n (L\varphi_n, L\varphi_n)_H + 2\sum\limits_{j=1}^{n-1} \alpha_j (L\varphi_n, L\varphi_j)_H \end{cases}$$

Приравниваем каждую из частных производных к нулю, полученные выражения делим на 2:

$$\begin{cases} \dfrac{1}{2} \cdot \dfrac{\partial S}{\partial \alpha_1} = -(L\varphi_1, f)_H + \alpha_1 (L\varphi_1, L\varphi_1)_H + \sum\limits_{j=2}^{n} \alpha_j (L\varphi_1, L\varphi_j)_H = 0 \\ \dfrac{1}{2} \cdot \dfrac{\partial S}{\partial \alpha_2} = -(L\varphi_2, f)_H + \alpha_2 (L\varphi_2, L\varphi_2)_H + \sum\limits_{j=1\, j\neq 2}^{n} \alpha_j (L\varphi_2, L\varphi_j)_H = 0 \\ ... \\ \dfrac{1}{2} \cdot \dfrac{\partial S}{\partial \alpha_n} = -(L\varphi_n, f)_H + \alpha_n (L\varphi_n, L\varphi_n)_H + \sum\limits_{j=1}^{n-1} \alpha_j (L\varphi_n, L\varphi_j)_H = 0 \end{cases}$$

Слагаемые, не зависящие от коэффициентов $\alpha_i, i = 1,...n$, переносим в правую часть каждого уравнения:

$$\begin{cases} \alpha_1 (L\varphi_1, L\varphi_1)_H + \sum\limits_{j=2}^{n} \alpha_j (L\varphi_1, L\varphi_j)_H = (L\varphi_1, f)_H \\ \alpha_2 (L\varphi_2, L\varphi_2)_H + \sum\limits_{j=1\, j\neq 2}^{n} \alpha_j (L\varphi_2, L\varphi_j)_H = (L\varphi_2, f)_H \\ .\ ... \\ \alpha_n (L\varphi_n, L\varphi_n)_H + \sum\limits_{j=1}^{n-1} \alpha_j (L\varphi_n, L\varphi_j)_H = (L\varphi_n, f)_H \end{cases}$$

Получена СЛАУ с неизвестными $\alpha_i, i = 1,...n$. Если записать ее в векторном виде, получим (14.29):

$$\begin{bmatrix} (L\varphi_1,L\varphi_1)_H & (L\varphi_1,L\varphi_2)_H & \dots & (L\varphi_1,L\varphi_n)_H \\ (L\varphi_2,L\varphi_1)_H & (L\varphi_2,L\varphi_2)_H & \dots & (L\varphi_2,L\varphi_n)_H \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ (L\varphi_n,L\varphi_1)_H & (L\varphi_n,L\varphi_2)_H & \dots & (L\varphi_n,L\varphi_n)_H \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \dots \\ \alpha_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (L\varphi_1,f)_H \\ (L\varphi_2,f)_H \\ \dots \\ (L\varphi_n,f)_H \end{bmatrix}$$

Матрица СЛАУ является матрицей Грама линейно независимых элементов $L\varphi_i \in H, i = 1,\dots n$.

$$Gr\,(L\varphi_1, L\varphi_2 \dots L\varphi_n) = \begin{bmatrix} (L\varphi_1,L\varphi_1)_H & (L\varphi_1,L\varphi_2)_H & \dots & (L\varphi_1,L\varphi_n)_H \\ (L\varphi_2,L\varphi_1)_H & (L\varphi_2,L\varphi_2)_H & \dots & (L\varphi_2,L\varphi_n)_H \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ (L\varphi_n,L\varphi_1)_H & (L\varphi_n,L\varphi_2)_H & \dots & (L\varphi_n,L\varphi_n)_H \end{bmatrix}$$

Поэтому указанная матрица не вырождена и положительно определена:

$$\det Gr\,(L\varphi_1, L\varphi_2 \dots L\varphi_n) \neq 0$$

$$Gr\,(L\varphi_1, L\varphi_2 \dots L\varphi_n) > 0$$

Отсюда следует, что решение СЛАУ (14.29) при любой правой части дифференциального уравнения (14.6) существует и единственно.

Функционал $S(\alpha_1,\alpha_2,\dots\alpha_n)$ имеет единственную точку, подозрительную на экстремум.

Шаг III

Исследуем критическую точку с помощью матрицы вторых частных производных.

$$S''(\alpha_1, \alpha_2 \dots \alpha_n) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial^2 S}{\partial \alpha_1^2} & \dots & \dfrac{\partial^2 S}{\partial \alpha_1\, \partial \alpha_n} \\ & \dots & \\ \dots & \dots & \dots \\ \dfrac{\partial^2 S}{\partial \alpha_n\, \partial \alpha_1} & \dots & \dfrac{\partial^2 S}{\partial \alpha_n^2} \end{bmatrix}$$

Вычисляя производные, убеждаемся в том, что для функционала $S(\alpha_1,\alpha_2,\dots\alpha_n)$ матрица $S''(\alpha_1, \alpha_2 \dots \alpha_n)$ с точностью до множителя 2 совпадаем с матрицей Грама линейно независимых элементов $L\varphi_i \in H, i = 1,\dots n$:

$$S''(\alpha_1, \alpha_2 \dots \alpha_n) = 2 \cdot Gr(L\varphi_1, L\varphi_2 \dots L\varphi_n) \qquad (14.35)$$

Приведем примеры совпадения их элементов:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2 S}{\partial \alpha_1^2} = 2\,(L\varphi_1, L\varphi_1)_H \\ \dfrac{\partial^2 S}{\partial \alpha_1 \partial \alpha_2} = 2(L\varphi_1, L\varphi_2)_H \\ \ldots\ldots\ldots \\ \dfrac{\partial^2 S}{\partial \alpha_1 \partial \alpha_n} = 2(L\varphi_1, L\varphi_n)_H \\ \ldots \\ \dfrac{\partial^2 S}{\partial \alpha_n^2} = 2(L\varphi_n, L\varphi_n)_H \end{cases}$$

Из (14.35) следует, что матрица $S''(\alpha_1, \alpha_2 ... \alpha_n)$, во-первых, не зависит от коэффициентов $\alpha_i, i = 1,...n$; во-вторых, положительно определена:

$$S''(\alpha_1, \alpha_2, ... \alpha_n) = S'' > 0 \tag{14.36}$$

Таким образом, точка, подозрительная на экстремум, является точкой локального минимума.

Иными словами, решение нормальной системы уравнений (14.29) является точкой локального минимума функционала $S(\alpha_1, \alpha_2, ... \alpha_n)$.

Ш а г IV

Покажем, что локальный минимум функционала $S(\alpha_1, \alpha_2, ... \alpha_n)$ является решением задачи (14.32), то есть **глобальным минимумом** $S(\alpha_1, \alpha_2, ... \alpha_n)$.

Доказательство использует свойства **квадратичной** функции и **положительную определенность** матрицы S''.

Для удобства будем записывать функционал $S(\alpha_1, \alpha_2, ... \alpha_n)$, у которого n скалярных аргументов, как функционал $S(\alpha)$ с одним векторным аргументом $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, ... \alpha_n) \in R^n$. Рассмотрим аргументы $\alpha \in R^n$ и $\alpha + h$, где $h \in R^n$.

По формуле Тейлора для $\forall \alpha \in R^n$, $\forall h \in R^n$ верно

$$S(\alpha + h) = S(\alpha) + (S'(\alpha), h) + \frac{1}{2} \cdot (S''(\alpha)\, h, h) \tag{14.37}$$

потому что зависимость $S(\alpha_1, \alpha_2, ... \alpha_n)$ от скалярных аргументов $\alpha_i, i = 1,...n$ является квадратичной.

Здесь $S'(\alpha)$ – градиент, вычисленный в точке $\alpha \in R^n$, $S''(\alpha)$ – матрица вторых частных производных, вычисленная в точке $\alpha \in R^n$.

В силу квадратичного характера зависимости $S(\alpha)$ никаких других слагаемых в формуле Тейлора нет.

Выше было отмечено, что элементы матрицы вторых частных производных не зависят от $\alpha_i, i = 1,...n$. Поэтому запишем матрицу без аргумента:

$$S''(\alpha) = S''.$$

В качестве $\alpha \in R^n$ рассмотрим найденную выше точку локального минимума, а любую другую точку пространства R^n будем записывать в виде $\alpha + h,$ где $h \in R^n$.

Так как в точке локального минимума градиент обращается в ноль, запишем

$$S'(\alpha) = 0$$

Так как S'' положительно определена, для $\forall h \neq 0, h \in R^n$ верно

$$(S''\, h,\ h) > 0$$

Поэтому справедливо неравенство

$$S(\alpha + h) = S(\alpha) + \frac{1}{2} \cdot (S''\, h,\ h) > S(\alpha) \qquad (14.38)$$

Таким образом, в любой точке из пространства R^n, не совпадающей с точкой локального минимума α, значение функционала **больше**, чем в точке локального минимума.

Следовательно, локальный минимум функционала $S(\alpha_1, \alpha_2, ...\alpha_n)$ является глобальным минимумом, и задача оптимизации (14.32) решена.

Конечномерный метод наименьших квадратов (для решения дифференциальных уравнений)

Разберем еще одну модификацию метода наименьших квадратов. В данном случае невязка на приближенном решении оценивается на некоторой **конечной заранее выбранной системе точек**. Метод называют **конечномерным МНК**.

Приближенное решение v задачи (14.6) ищем в виде

$$v = \alpha_1\varphi_1 + \alpha_2\varphi_2 + \ldots + \alpha_n\varphi_n \qquad (14.40)$$

Чтобы оценить невязку, выбираем точки $x_j,\ j = 1,\ldots m,\ \ m > n.$

На системе точек $x_j, j = 1,\ldots m,\ \ m > n$ **определим невязку** $Lv - f$ **как элемент пространства** R^m:

$$Lv - f = \begin{bmatrix} (Lv - f)|_{x=x_1} \\ (Lv - f)|_{x=x_2} \\ \ldots \\ (Lv - f)|_{x=x_m} \end{bmatrix} \in R^m \qquad (14.41)$$

Компонентой с номером j является значение невязки при $x = x_j$. Значения невязки при других значениях аргумента x не рассматриваем.

Определение 5. Конечномерный метод наименьших квадратов (для решения дифференциальных уравнений) состоит в следующем:

приближенное решение v, найденное в подпространстве K_n, должно обеспечить в указанном подпространстве **минимально возможную невязку дифференциального уравнения на выбранной системе точек** $x_j, j = 1,\ldots m,\ \ m > n$ **в норме пространства** R^m:

$$\| Lv - f \|_{R^m} \to \min \qquad (14.42)$$

Минимизация функционала (14.42) осуществляется по всем элементам v, принадлежащим конечномерному подпространству K_n.

Чтобы сформулировать утверждение о свойствах метода, используем точки $x_j, j = 1,\ldots m,\ \ m > n$ и определим элементы $f \in R^m$ и $L_i \in R^m, i = 1,\ldots n$:

$$f = \begin{bmatrix} f|_{x=x_1} \\ f|_{x=x_2} \\ \ldots \\ f|_{x=x_m} \end{bmatrix} \in R^m,\ \ L_1 = \begin{bmatrix} L\varphi_1|_{x=x_1} \\ L\varphi_1|_{x=x_2} \\ \ldots \\ L\varphi_1|_{x=x_m} \end{bmatrix} \in R^m,\ \ \ldots L_n = \begin{bmatrix} L\varphi_n|_{x=x_1} \\ L\varphi_n|_{x=x_2} \\ \ldots \\ L\varphi_n|_{x=x_m} \end{bmatrix} \in R^m \qquad (14.43)$$

Элемент $f \in R^m$ представляет собой вектор значений функции f – правой части дифференциального уравнения (14.6), на выбранной системе точек. Так как выбрано m точек, размерность вектора составила m.

Элемент $L_i \in R^m$ представляет собой вектор значений оператора L, примененного к базисной функции φ_i. Значения функционала $L\varphi_i$ рассматриваются только при $x_j, j = 1,...m,\ m > n$. Так как выбрано m точек, размерность L_i составила m

Утверждение 5. Пусть базисные функции $\varphi_i \in K, i = 1,...n$ подпространства K_n, и точки $x_j, j = 1,...m,\ m > n$ выбраны так, что элементы $L_i \in R^m, i = 1,...n$, линейно независимы.

Тогда приближенное решение задачи (14.6), обеспечивающее в классе K_n на системе точек $x_j, j = 1,...m,\ m > n$ минимальную невязку (14.42), существует и единственно, а коэффициенты $\alpha_i, i = 1,...n$ разложения v по базисным функциям $\varphi_i \in K, i = 1,...n$ являются решением СЛАУ

$$\begin{bmatrix} (L_1, L_1)_{R^m} & (L_1, L_2)_{R^m} & ... & (L_1, L_n)_{R^m} \\ (L_2, L_1)_{R^m} & (L_2, L_2)_{R^m} & ... & (L_2, L_n)_{\mathrm{R}^m} \\ ... & ... & ... & ... \\ (L_n, L_1)_{\mathrm{R}^m} & (L_n, L_2)_{R^m} & ... & (L_n, L_n)_{R^m} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ ... \\ \alpha_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (L_1, f)_{R^m} \\ (L_2, f)_{R^m} \\ ... \\ (L_n, f)_{R^m} \end{bmatrix} \qquad (14.44)$$

СЛАУ (14.44) называют **нормальной системой уравнений**.

Здесь символом $(*\cdot,*)_{R^m}$ обозначено скалярное произведение в пространстве R^m.

Доказательство (схема)

Заменим задачу (14.42) о минимизации нормы невязки на эквивалентную задачу минимизации квадрата нормы невязки:

$$\| Lv - f \|^2_{R^m} = (Lv - f, Lv - f)_{R^m} \to \min \qquad (14.45)$$

Так как минимизация проводится по элементам из K_n и все элементы K_n записываются в виде (14.40), функционал задачи следует рассматривать как зависящий от параметров $\alpha_i, i = 1,...n$.

Функционал задачи (14.45) обозначим $S(\alpha_1, \alpha_2, ...\alpha_n)$. Тогда (14.45) записывается в виде

$$S(\alpha_1, \alpha_2, ...\alpha_n) \underset{\alpha \in R^n}{\to} \min. \qquad (14.46)$$

Точки, подозрительные на экстремум, находим из условий

$$\frac{\partial S}{\partial \alpha_i} = 0, i = 1,\dots n \qquad (14.47)$$

Систему уравнений (14.47) называют **нормальной системой уравнений**.

Этапы доказательства Утверждения 5 состоят в следующем:

1) линейная независимость элементов $L_i \in R^m, i = 1,\dots n$ обеспечивает существование и единственность решения нормальной системы уравнений (14.47);

2) в силу линейной независимости элементов $L_i \in R^m, i = 1,\dots n$ единственное решение системы (14.47) является точкой локального минимума;

3) в силу свойств функционала $S(\alpha_1, \alpha_2, \dots \alpha_n)$ локальный минимум является глобальным.

Кратко пройдем эти этапы.

Шаг I

Выясним, как выглядит невязка $Lv - f$ как элемент пространства R^m.

Для этого запишем невязку на приближенном решении v по определению, подставим решение v в виде (14.40) и воспользуемся свойством линейности дифференциального оператора L:

$$Lv - f = \underbrace{L[\sum_{i=1}^{n} \alpha_i \varphi_i] - f = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i [L\varphi_i] - f}_{\text{линейный оператор применили к линейной комбинации элементов и получили линейную комбинацию результатов применения оператора к каждому из элементов}} \qquad (14.48)$$

Таким образом, невязка на приближенном решении v записана через коэффициенты $\alpha_i, i = 1,\dots n$.

Далее в соответствии с определением (14.41) запишем невязку на системе точек $x_j, j = 1,\dots m$, то есть как элемент конечномерного пространства R^m.

Для этого компоненту невязки с номером j, $j = 1,\dots m$ записываем как значение (14.48), вычисленное в точке $x_j, j = 1,\dots m$:

$$Lv - f = \begin{bmatrix} \{\sum\limits_{i=1}^{n} \alpha_i [L\varphi_i] - f\}|_{x=x_1} \\ \{\sum\limits_{i=1}^{n} \alpha_i [L\varphi_i] - f\}|_{x=x_2} \\ \dots \\ \{\sum\limits_{i=1}^{n} \alpha_i [L\varphi_i] - f\}|_{x=x_m} \end{bmatrix}$$

Вектор невязки $Lv - f$ может быть представлен в виде разности двух векторов:

$$Lv - f = \begin{bmatrix} \sum\limits_{i=1}^{n} \alpha_i [L\varphi_i]|_{x=x_1} \\ \sum\limits_{i=1}^{n} \alpha_i [L\varphi_i]|_{x=x_2} \\ \dots \\ \sum\limits_{i=1}^{n} \alpha_i [L\varphi_i]|_{x=x_m} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} f|_{x=x_1} \\ f|_{x=x_2} \\ \dots \\ f|_{x=x_m} \end{bmatrix}$$

Для первого вектора компонента с номером j представляет собой линейную комбинацию значений оператора, примененного к различным базисным функциям $\varphi_i \in K, i = 1,\dots n$, но вычисленных в одной и той же точке x_j .

Коэффициенты всех линейных комбинаций одинаковы, поэтому в соответствии с определением (14.43) первый из векторов может быть переписан в виде

$$Lv - f = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \cdot \begin{bmatrix} [L\varphi_i]|_{x=x_1} \\ [L\varphi_i]|_{x=x_2} \\ \dots \\ [L\varphi_i]|_{x=x_m} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} f|_{x=x_1} \\ f|_{x=x_2} \\ \dots \\ f|_{x=x_m} \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i L_i - f$$

Таким образом, для элемента v из K_n, представленного в виде линейной комбинации базисных функций $\varphi_i \in K, i = 1,\dots n$ по формуле

$$v = \alpha_1\varphi_1 + \alpha_2\varphi_2 + \dots + \alpha_n\varphi_n$$

невязка $Lv - f$ на системе точек $x_j, j = 1,\dots m$ как элемент R^m есть линейная комбинация векторов $L_i \in R^m, i = 1,\dots n$

с теми же коэффициентами:

$$Lv - f = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i L_i - f \qquad (14.49)$$

Шаг II

Используем (14.49) и выясним, как выглядит $S(\alpha_1,\alpha_2,...\alpha_n)$.

$$S(\alpha_1,\alpha_2,...\alpha_n)=(Lv-f,Lv-f)_{R^m}=$$

$$=(\sum_{i=1}^{n}\alpha_i L_i-f,\sum_{j=1}^{n}\alpha_j L_j-f)_{R^m}=$$

$$=(f,f)_{R^m}+(\sum_{i=1}^{n}\alpha_i L_i,\sum_{j=1}^{n}\alpha_j L_j)_{R^m}-2\sum_{i=1}^{n}\alpha_i(L_i,f)_{R^m}$$

Оказалось, что $S(\alpha_1,\alpha_2,...\alpha_n)$ является квадратичной функцией относительно коэффициентов $\alpha_i, i=1,...n$:

$$S(\alpha_1,\alpha_2,...\alpha_n)=$$

$$=(f,f)_{R^m}-2\sum_{i=1}^{n}\alpha_i(L_i,f)_{R^m}+\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\alpha_i\alpha_j(L_i,L_j)_{R^m} \qquad (14.50)$$

Функционал $S(\alpha_1,\alpha_2,...\alpha_n)$ устроен так же, как и функционал (14.34). Только вместо скалярных произведений в бесконечномерном гильбертовом пространстве H задействованы скалярные произведения в конечномерном пространстве R^m.

Шаг III и далее

Точки, подозрительные на экстремум, находим из условия

$$\frac{\partial S}{\partial\alpha_i}=0,\ i=1,...n$$

Нормальная система уравнений принимает вид

$$\begin{cases}\dfrac{\partial S}{\partial\alpha_1}=-2(L_1,f)_{R^m}+2\alpha_1(L_1,L_1)_{R^m}+2\sum\limits_{j=2}^{n}\alpha_j(L_1,L_j)_{R^m}=0\\ \dfrac{\partial S}{\partial\alpha_2}=-2(L_2,f)_{R^m}+2\alpha_2(L_2,L_2)_{R^m}+2\sum\limits_{j=1\, j\neq 2}^{n}\alpha_j(L_2,L_j)_{R^m}=0\\ ...\\ \dfrac{\partial S}{\partial\alpha_n}=-2(L_n,f)_{R^m}+2\alpha_n(L_n,L_n)_{R^m}+2\sum\limits_{j=1}^{n-1}\alpha_j(L_n,L_j)_{R^m}=0\end{cases}$$

Это СЛАУ с неизвестными $\alpha_i, i = 1,...n$. Если ее записать в векторном виде, получим (14.44):

$$\begin{bmatrix} (L_1,L_1)_{R^m} & (L_1,L_2)_{R^m} & ... & (L_1,L_n)_{R^m} \\ (L_2,L_1)_{R^m} & (L_2,L_2)_{R^m} & ... & (L_2,L_n)_{R^m} \\ ... & ... & ... & ... \\ (L_n,L_1)_{R^m} & (L_n,L_2)_{R^m} & ... & (L_n,L_n)_{R^m} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ ... \\ \alpha_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (L_1,f)_{R^m} \\ (L_2,f)_{R^m} \\ ... \\ (L_n,f)_{R^m} \end{bmatrix}$$

Матрица СЛАУ (14.44) является матрицей Грама линейно независимых векторов $L_i \in R^m, i = 1,...n$:

$$Gr\,(L_1, L_2 ... L_n) = \begin{bmatrix} (L_1,L_1)_{R^m} & (L_1,L_2)_{R^m} & ... & (L_1,L_n)_{R^m} \\ (L_2,L_1)_{R^m} & (L_2,L_2)_{R^m} & ... & (L_2,L_n)_{R^m} \\ ... & ... & ... & ... \\ (L_n,L_1)_{R^m} & (L_n,L_2)_{R^m} & ... & (L_n,L_n)_{R^m} \end{bmatrix}$$

Поэтому указанная матрица не вырождена и положительно определена:

$$\det Gr\,(L_1, L_2 ... L_n) \neq 0$$

$$Gr\,(L_1, L_2 ... L_n) > 0$$

Отсюда следует, что решение СЛАУ (14.44) при любой правой части дифференциального уравнения (14.6) существует и единственно.

Функционал $S(\alpha_1,\alpha_2,...\alpha_n)$ имеет единственную точку, подозрительную на экстремум.

Аналогично Утверждению 4 доказывается:

Точка, подозрительная на экстремум, является точкой локального минимума функционала $S(\alpha_1,\alpha_2,...\alpha_n)$.

Решение нормальной системы уравнений (14.44), являясь точкой локального минимума функционала $S(\alpha_1,\alpha_2,...\alpha_n)$, является решением задачи минимизации (14.42), то есть глобальным минимумом $S(\alpha_1,\alpha_2,...\alpha_n)$.

Считаем, что Утверждение 5 доказано.