

1 Метод Ритца

Выделяют два основных типа методов решения вариационных задач. К первому типу относятся методы, сводящие исходную задачу к решению дифференциальных уравнений. Эти методы очень хорошо развиты и им будет посвящено основное время на лекциях. Альтернативой являются так называемые прямые методы. Эти методы тем или иным способом решают исходную задачу по поиску функции в заданном классе, которая доставляла бы экстремальное значение заданному функционалу. Один из самых популярных методов этого класса — метод Ритца (также называемый методом Рэлея-Ритца).

В основе метода Ритца лежит построение минимизирующей последовательности функций. Пусть, например, необходимо найти минимум функционала $V[y]$ в классе функций M . Чтобы задача имела смысл, потребуем, чтобы существовал конечный инфимум μ значений функционала и в классе допустимых функций существовали функции, на которых функционал принимает конечные значения. Тогда по определению инфимума существует минимизирующая последовательность функций $y_1, y_2, \dots, y_n, \dots$ такая, что

$$\lim_{n \rightarrow \infty} V[y_n] = \mu .$$

Если существует предел y^* этой последовательности, она и будет решением исходной задачи, так как будет законен предельный переход

$$V[y^*] = \lim_{n \rightarrow \infty} V[y_n] .$$

Каким же образом строится эта минимизирующая последовательность в методе Ритца? Сначала изложим общую идею, а потом рассмотрим ее конкретную реализацию для одного типа вариационных задач. Итак, сначала необходимо выбрать некоторую систему функций, которую мы назовем базисной:

$$\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n, \dots$$

К функциям φ_n выдвигаются два требования. Во-первых, сами эти функции принадлежат классу M , а во-вторых — любая конечная линейная комбинация этих функций вида

$$y_n = c_1 \varphi_1 + c_2 \varphi_2 + \dots + c_n \varphi_n$$

принадлежит тому же классу M . Исходная задача заменяется следующей: минимизировать функцию многих переменных

$$\max_{c_1, \dots, c_n} V[c_1 \varphi_1 + \dots + c_n \varphi_n]$$

Решая эту задачу известными (из курса «Методов оптимизации», например) методами, получаем некоторое минимальное значение μ_n . Поскольку при увеличении числа слагаемых мы только расширяем множество функций, на котором ищется минимум, будет справедлива цепочка неравенств $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \mu_n \geq \mu_{n+1} \geq \dots$. Можно доказать, что при некоторых условиях эта последовательность значений сходится к μ .

Теорема. Если функционал $V[y]$ непрерывен (в смысле метрики пространства, в котором он рассматривается) и система функций φ_n полная, то

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mu_n = \mu ,$$

где μ — минимум функционала $V[y]$.

Замечание. Быстрота сходимости метода Рунге сильно зависит от выбора системы базисных функций. Однако при удачном выборе для достижения приемлемой точности часто бывает достаточно 3-4 слагаемых в линейной комбинации.

Применим изложенную идею к достаточно часто встречающейся вариационной задаче. Итак, пусть необходимо минимизировать значение функционала

$$V[y] = \int_0^1 \left[p(x) (y'(x))^2 + q(x) y^2(x) - 2f(x) y(x) \right] dx$$

на множестве функций $M = \left\{ y(x) \mid y(x) \in C_{[0,1]}^2, y(0) = y(1) = 0 \right\}$. Зафиксируем теперь некоторую конечную систему линейно-независимых функций $\{\varphi_i\}_{i=1}^n$, которые удовлетворяют однородным краевым условиям

$$\varphi_i(0) = \varphi_i(1) = 0, \quad i = \overline{1, n}.$$

Вместо исходной задачи будем решать значительно более узкую задачу минимизации функционала на множестве линейных комбинаций

$$\varphi(x) = \sum_{i=1}^n c_i \varphi_i(x).$$

Подставим эту линейную комбинацию в функционал:

$$\begin{aligned} V[\varphi(x)] &= V \left[\sum_{i=1}^n c_i \varphi_i(x) \right] = \\ &= \int_0^1 \left\{ p(x) \left[\sum_{i=1}^n c_i \varphi_i'(x) \right]^2 + q(x) \left[\sum_{i=1}^n c_i \varphi_i(x) \right]^2 - 2f(x) \sum_{i=1}^n c_i \varphi_i(x) \right\} dx. \end{aligned}$$

Чтобы найти минимум функционала, воспользуемся необходимым условием экстремума:

$$\frac{\partial V}{\partial c_j} = 0, \quad j = \overline{1, n}$$

Дифференцирование функционала по c_j дает

$$\frac{\partial V}{\partial c_j} = \int_0^1 \left\{ 2p(x) \sum_{i=1}^n c_i \varphi_i'(x) \varphi_j'(x) + 2q(x) \sum_{i=1}^n c_i \varphi_i(x) \varphi_j(x) - 2f(x) \varphi_j(x) \right\} dx.$$

После очевидных преобразований получаем систему линейных алгебраических уравнений для нахождения коэффициентов линейной комбинации:

$$\sum_{i=1}^n \left[\int_0^1 (p(x) \varphi_i'(x) \varphi_j'(x) + q(x) \varphi_i(x) \varphi_j(x)) dx \right] c_i - \int_0^1 f(x) \varphi_j(x) dx = 0, \quad j = \overline{1, n}$$

В матричной форме эта система запишется в виде $Ac = b$, где

$$a_{ij} = \int_0^1 (p(x) \varphi_i'(x) \varphi_j'(x) + q(x) \varphi_i(x) \varphi_j(x)) dx,$$

$$b_j = \int_0^1 f(x) \varphi_j(x) dx$$

Рассмотрим теперь вопрос выбора базисных функций.

1.1 Кусочно-линейный базис

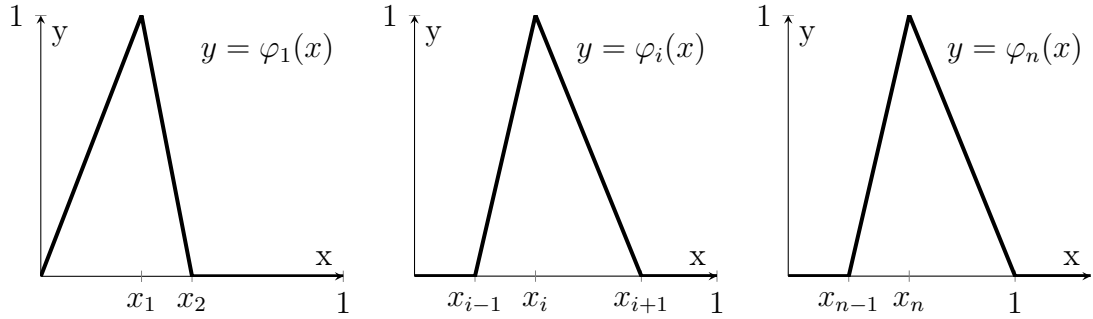
Простейшим вариантом выбора базиса является система кусочно-линейных функций. Чтобы ее построить, необходимо вначале задать разбиение отрезка $[0, 1]$ на n отрезков:

$$0 = x_0 < x_1 < \dots < x_n < x_{n+1} = 1 .$$

Полагая $h_i = x_{i+1} - x_i$, определим следующие функции:

$$\varphi_i(x) = \begin{cases} 0, & \text{если } 0 \leq x \leq x_{i-1}, \\ \frac{1}{h_{i-1}}(x - x_{i-1}), & \text{если } x_{i-1} < x \leq x_i, \\ \frac{1}{h_i}(x_{i+1} - x), & \text{если } x_i < x \leq x_{i+1}, \\ 0, & \text{если } x_{i+1} < x < 1 . \end{cases}, \quad i = \overline{1, n}$$

Ниже на рисунке приведены схематические графики этих базисных функций.



Производные базисных функций будут кусочно-постоянными функциями и их нетрудно найти:

$$\varphi'_i(x) = \begin{cases} 0, & \text{если } 0 \leq x \leq x_{i-1}, \\ \frac{1}{h_{i-1}}, & \text{если } x_{i-1} < x \leq x_i, \\ -\frac{1}{h_i}, & \text{если } x_i < x \leq x_{i+1}, \\ 0, & \text{если } x_{i+1} < x < 1 . \end{cases}, \quad i = \overline{1, n}$$

Поскольку i -ая функция отлична от нуля только на промежутке $(x_{i-1}, x_{i+1}]$, то справедливы равенства

$$\varphi_i(x)\varphi_j(x) = 0 \quad \text{и} \quad \varphi'_i(x)\varphi'_j(x) = 0, \quad i, j = \overline{1, n}, \quad j \neq i-1, j \neq i, j \neq i+1.$$

Последнее означает, что матрица системы уравнений для c_j при таком выборе базисных функций будет трехдиагональной. А именно, ненулевыми будут элементы:

$$\begin{aligned} a_{i,i+1} &= \int_0^1 [p(x)\varphi'_i(x)\varphi'_{i+1}(x) + q(x)\varphi_i(x)\varphi_{i+1}(x)] dx = \\ &= -\left(\frac{1}{h_i}\right)^2 \int_{x_i}^{x_{i+1}} p(x) dx + \underbrace{\left(\frac{1}{h_i}\right)^2 \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x_{i+1} - x)(x - x_i) q(x) dx}_{I_{1,i}}, \quad i = \overline{1, n-1} . \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_{ii} &= \int_0^1 \left[p(x) (\varphi'_i(x))^2 + q(x) \varphi_i^2(x) \right] dx = \\
&= \left(\frac{1}{h_{i-1}} \right)^2 \int_{x_{i-1}}^{x_i} p(x) dx + \left(\frac{1}{h_i} \right)^2 \int_{x_i}^{x_{i+1}} p(x) dx + \\
&+ \underbrace{\left(\frac{1}{h_{i-1}} \right)^2 \int_{x_{i-1}}^{x_i} (x - x_{i-1})^2 q(x) dx}_{I_{2,i}} + \underbrace{\left(\frac{1}{h_i} \right)^2 \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x_{i+1} - x)^2 q(x) dx}_{I_{3,i}}, \quad i = \overline{1, n},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_{i,i-1} &= \int_0^1 \left[p(x) \varphi'_i(x) \varphi'_{i-1}(x) + q(x) \varphi_i(x) \varphi_{i-1}(x) \right] dx = \\
&= - \underbrace{\left(\frac{1}{h_{i-1}} \right)^2 \int_{x_{i-1}}^{x_i} p(x) dx}_{I_{4,i}} + \left(\frac{1}{h_{i-1}} \right)^2 \int_{x_{i-1}}^{x_i} (x_i - x) (x - x_{i-1}) q(x) dx, \quad i = \overline{2, n},
\end{aligned}$$

Столбец правых частей будет состоять из элементов вида

$$b_i = \int_0^1 f(x) \varphi_i(x) dx = \underbrace{\frac{1}{h_{i-1}} \int_{x_{i-1}}^{x_i} (x - x_{i-1}) f(x) dx}_{I_{5,i}} + \underbrace{\frac{1}{h_i} \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x_{i+1} - x) f(x) dx}_{I_{6,i}}, \quad i = \overline{1, n}.$$

Используя введенные выше обозначения для некоторых интегралов, эти же выражения можно кратко записать следующим образом:

$$\begin{aligned}
a_{ii} &= I_{4,i} + I_{4,i+1} + I_{2,i} + I_{3,i}, \quad i = \overline{2, n}, \\
a_{i,i+1} &= -I_{4,i+1} + I_{1,i}, \quad i = \overline{1, n-1}, \\
a_{i,i-1} &= -I_{4,i} + I_{1,i-1}, \quad i = \overline{2, n}, \\
b_i &= I_{5,i} + I_{6,i}, \quad i = \overline{1, n}.
\end{aligned}$$

Итак, чтобы построить трехдиагональную систему линейных уравнений, необходимо вычислить $6n$ интегралов. Для некоторых задач это можно сделать аналитически, но чаще приходится прибегать к численным методам интегрирования (например, можно использовать правило Симпсона, см. Приложение).

Запишем теперь формальный алгоритм метода Рунге с кусочно-линейным базисом.

Кусочно-линейный метод Ритца

ВХОД : Целое число $n \geq 1$; точки $x_0 = 0 < x_1 < \dots < x_n < x_{n+1} = 1$.

ВЫХОД : Коэффициенты c_1, \dots, c_n .

ШАГ 1 **for** $i \leftarrow 0$ **to** n **do**
| $h_i \leftarrow x_{i+1} - x_i$
end

ШАГ 2 **for** $i \leftarrow 1$ **to** n **do**
| Определяем базисные функции φ_i :
|
$$\varphi_i(x) = \begin{cases} 0, & \text{если } 0 \leq x \leq x_{i-1}, \\ \frac{1}{h_{i-1}}(x - x_{i-1}), & \text{если } x_{i-1} < x \leq x_i, \\ \frac{1}{h_i}(x_{i+1} - x), & \text{если } x_i < x \leq x_{i+1}, \\ 0, & \text{если } x_{i+1} < x < 1. \end{cases}$$

end

ШАГ 3 **for** $i \leftarrow 1$ **to** $n - 1$ **do**
| Вычисляем $I_{1,i}, I_{2,i}, I_{3,i}, I_{4,i}, I_{5,i}, I_{6,i}$.
end

Вычисляем $I_{2,n}, I_{3,n}, I_{4,n}, I_{4,n+1}, I_{5,n}, I_{6,n}$.

ШАГ 4 **for** $i \leftarrow 1$ **to** $n - 1$ **do**
| $\alpha_i \leftarrow I_{4,i} + I_{4,i+1} + I_{2,i} + I_{3,i}$
| $\beta_i \leftarrow I_{1,i} - I_{4,i+1}$
| $b_i \leftarrow I_{5,i} + I_{6,i}$
end

ШАГ 5 Вычисляем
 $\alpha_n \leftarrow I_{4,n} + I_{4,n+1} + I_{2,n} + I_{3,n}$
 $b_n \leftarrow I_{5,n} + I_{6,n}$

ШАГ 6 Начинаем решать трехдиагональную систему уравнений (шаги 6-10)

$$a_1 \leftarrow \alpha_1$$

$$\zeta_1 \leftarrow \frac{\beta_1}{\alpha_1}$$

$$z_1 \leftarrow \frac{b_1}{a_1}$$

ШАГ 7 **for** $i \leftarrow 2$ **to** $n - 1$ **do**
| $a_i \leftarrow \alpha_i - \beta_{i-1}\zeta_{i-1}$
| $\zeta_i \leftarrow \frac{\beta_i}{a_i}$
| $z_i \leftarrow \frac{b_i - \beta_{i-1}z_{i-1}}{a_i}$
end

ШАГ 8 Вычисляем
 $a_n \leftarrow \alpha_n - \beta_{n-1}\zeta_{n-1}$
 $z_n \leftarrow \frac{b_n - \beta_{n-1}z_{n-1}}{a_n}$

ШАГ 9 Полагаем $c_n \leftarrow z_n$
ВЫВЕСТИ: c_n

ШАГ 10 **for** $i \leftarrow n - 1$ **to** 1 **do**
| $c_i \leftarrow z_i - \zeta_i c_{i+1}$

Рассмотрим пример использования метода Рунге, в котором интегралы (шаги 3, 4 и 5) находятся в явном виде.

Пример. Пусть необходимо минимизировать функционал

$$V[y] = \int_0^1 \left([y'(x)]^2 + \pi^2 y^2(x) - 4\pi^2 \sin \pi x \right) dx ,$$

на множестве $C_{[0,1]}^2$ при заданных граничных условиях $y(0) = y(1) = 0$.

Решение.

Положим $h_i = h = 0.1$, то есть $x_i = 0.1i$, $i = \overline{0,9}$. Вычислим интегралы:

$$\begin{aligned} I_{1,i} &= 100 \int_{0.1i}^{0.1i+0.1} (0.1i + 0.1 - x) (x - 0.1i) \pi^2 dx = \frac{\pi^2}{60} , \\ I_{2,i} &= 100 \int_{0.1i-0.1}^{0.1i} (x - 0.1i + 0.1)^2 \pi^2 dx = \frac{\pi^2}{30} , \\ I_{3,i} &= 100 \int_{0.1i}^{0.1i+0.1} (0.1i + 0.1 - x)^2 \pi^2 dx = \frac{\pi^2}{30} , \\ I_{4,i} &= 100 \int_{0.1i-0.1}^{0.1i} dx = 10 , \\ I_{5,i} &= 10 \int_{0.1i-0.1}^{0.1i} (x - 0.1i + 0.1) 2\pi^2 \sin \pi x dx = \\ &= -2\pi \cos 0.1\pi i + 20 [\sin 0.1\pi i - \sin (0.1i - 0.1)\pi] , \\ I_{6,i} &= 10 \int_{0.1i}^{0.1i+0.1} (0.1i + 0.1 - x) 2\pi^2 \sin \pi x dx = \\ &= 2\pi \cos 0.1\pi i - 20 [\sin (0.1i + 0.1)\pi - \sin 0.1\pi i] . \end{aligned}$$

Диагональные элементы матрицы системы будут равны

$$\begin{aligned} a_{i,i} &= 20 + \frac{\pi^2}{15} \quad i = \overline{1,9} , \\ a_{i,i+1} &= -10 + \frac{\pi^2}{60} \quad i = \overline{1,8} , \\ a_{i,i+1} &= -10 + \frac{\pi^2}{60} \quad i = \overline{2,9} , \\ b_i &= 40 \sin 0.1\pi i [1 - \cos 0.1\pi] \quad i = \overline{1,9} . \end{aligned}$$

Решая трехдиагональную систему, получаем следующие значения коэффициентов:

$$\begin{aligned} c_9 &= 0.310287, & c_8 &= 0.590200, & c_7 &= 0.812341, \\ c_6 &= 0.954964, & c_5 &= 1.004109, & c_4 &= 0.954964, \\ c_3 &= 0.812341, & c_2 &= 0.590200, & c_1 &= 0.310287. \end{aligned}$$

Итак, мы получили приближенное решение вариационной задачи в виде линейной комбинации

$$\varphi(x) = \sum_{i=1}^9 c_i \varphi_i(x),$$

в то время как точным решением является $y(x) = \sin \pi x$ (**проверьте это!**). Следующая таблица демонстрирует ошибку кусочно-линейной аппроксимации, которая, как нетрудно заметить, имеет порядок $O(h^2)$.

i	x_i	$\varphi(x_i)$	$y(x_i)$	$ \varphi(x_i) - y(x_i) $
1	0.1	0.310287	0.309017	0.00127
2	0.2	0.590200	0.587785	0.00241
3	0.3	0.812341	0.809017	0.00332
4	0.4	0.954964	0.951057	0.00390
5	0.5	1.004108	1.000000	0.00411
6	0.6	0.954964	0.951057	0.00390
7	0.7	0.812341	0.809017	0.00332
8	0.8	0.590200	0.587785	0.00241
9	0.9	0.310287	0.309017	0.00127

■

1.2 Базис из В-сплайнов

Кусочно-линейная аппроксимация решения вариационной задачи, полученная в предыдущем пункте, является непрерывной, но не дифференцируемой на промежутке $[0, 1]$. Более разумным представляется выбор базисных функций из класса $C_{[0,1]}^2$. Построение простейших функций такого рода производится точно так же, как и построение кубических сплайнов. Напомним определение последних.

Определение. Кубическим интерполяционным сплайном для функции $f(x)$, построенным по пяти точкам x_0, \dots, x_4 , называется функция $S(x)$, удовлетворяющая следующим требованиям:

1. $S(x)$ представляет собой кубический полином, обозначаемый $S_j(x)$, на каждом интервале $[x_j, x_{j+1}]$, $j = 0, 1, 2, 3$;
2. $S_j(x_j) = f(x_j)$ и $S_j(x_{j+1}) = f(x_{j+1})$, $j = 0, 1, 2, 3$;
3. $S_{j+1}(x_{j+1}) = S_j(x_{j+1})$, $j = 0, 1, 2$;
4. $S'_{j+1}(x_{j+1}) = S'_j(x_{j+1})$, $j = 0, 1, 2$;
5. $S''_{j+1}(x_{j+1}) = S''_j(x_{j+1})$, $j = 0, 1, 2$;
6. Выполняется один из следующих наборов граничных условий:
 - (a) $S''(x_0) = S''(x_4) = 0$ (естественные условия);
 - (b) $S'(x_0) = f'(x_0)$ и $S'(x_4) = f'(x_4)$.

Каждый из четырех многочленов $S_j(x)$ задается четырьмя коэффициентами, поэтому для определения сплайна нужно 16 параметров. Чтобы сплайн определялся единственным образом, нужно требовать выполнения лишь одного из условий пункта 6.

При построении базисных функций мы будем пользоваться так называемыми В-сплайнами (от *bell-shaped splines*, т.е. колоколообразные сплайны). Они отличаются тем, что вместо пункта 2 определения требуется выполнение условия 2':

$$S(x_j) = f(x_j), \quad j = 0, 2, 4,$$

и двух условий на концах:

$$S''(x_0) = S''(x_4) = 0 \quad \text{и} \quad S'(x_0) = S'(x_4) = 0.$$

