

# Метод Ритца

Николай Животенко  
niko.zvt@gmail.com

30 августа 2020 г.

## Введение



**Информация:** Вариационное исчисление – математическая дисциплина, посвящённая отысканию экстремальных (наибольших и наименьших) значений функционалов – переменных величин, зависящих от выбора одной или нескольких функций. Вариационное исчисление является естественным развитием той главы математического анализа, которая посвящена задаче отыскания экстремумов функций. Возникновение и развитие вариационного исчисления тесно связано с задачами механики, физики и других технических наук.

Ещё в античные времена появились первые вариационные проблемы, относящиеся к категории изопериметрических задач – например, задача Дидоны. Первый вариационный принцип сформулировал Герон Александрийский для траекторий отражённых световых лучей в работе «Катоптрика» (I в. н.э.). В средневековой Европе изопериметрическими задачами занимались И. Сакробоско (XIII в.) и Т. Брадвардин (XIV в.). После разработки анализа появились новые типы вариационных задач, в основном механического характера. Ньютон в «Математических началах натуральной философии» (1687 г.) решает задачу: найти форму тела вращения, обеспечивающую наименьшее сопротивление при движении в газе или жидкости при заданных размерах. Важной исторической задачей, давшей толчок к развитию современного варианта вариационного исчисления, стала задача о брахистохроне (1696 г.). Её быстрое решение сразу несколькими математиками показало огромные возможности новых методов. Среди других задач стоит отметить определение формы цепной линии, то есть формы равновесия тяжёлой однородной нити (1690 г.). Общих методов решения вариационных задач в этот период ещё не существовало, каждая задача решалась с помощью остроумных и не всегда безупречных геометрических рассуждений.

Решающий вклад в развитие вариационного исчисления внесли Леонард Эйлер и Жозеф Лагранж. Эйлеру принадлежит первое систематическое изложение вариационного исчисления и сам термин (1766 г.). Лагранж независимо получил многие основополагающие результаты и ввёл понятие вариации (с 1755 г.). На этом этапе были выведены уравнения Эйлера – Лагранжа.

Методы вариационного исчисления широко применяются в различных областях математики. Например, в дифференциальной геометрии с их помощью ищут геодезические линии и минимальные поверхности. В физике вариационный метод – одно из мощнейших орудий получения уравнений движения, как для дискретных, так и для распределённых систем, в том числе и для физических полей. Методы вариационного исчисления применимы и в статике.

Выделяют два основных типа методов решения вариационных задач. К первому типу относятся методы, сводящие исходную задачу к решению дифференциальных уравнений. 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.



**Важно!** К сожалению, метод Ритца очень часто путают с методом Рэлея-Ритца. Название "метод Рэлея-Ритца" (в контексте одного из прямых методов вариационного исчисления) является распространённым неправильным термином. Метод Рэлея-Ритца — это численный метод поиска приближенных решений уравнений на собственные значения, которые сложно решить аналитически. Он особенно актуален в контексте решения физических краевых задач, которые могут быть выражены в виде матричных дифференциальных уравнений. Он используется в машиностроении для аппроксимации собственных мод физической системы, например для нахождения резонансных частот конструкции, что позволяет создать соответствующее демпфирование. Этот метод был изобретён Вальтером Ритцем в 1909 году, поэтому (по причине некоторого сходства) сохраняется неправильное употребление названия.

# 1 Вариационное исчисление

## 1.1 Понятие функционала

В курсе высшей математики вводилось понятие функции. Если некоторому числу  $x$  из области  $D$  ставится в соответствие по определённому правилу или закону число  $y$ , то говорят, что задана функция  $y = f(x)$ . Область  $D$  называют областью определения функции  $f(x)$ .

Если же функции  $f(x)$  ставится в соответствие по определённому правилу или закону число  $J$ , то говорят, что задан функционал  $J = \Phi[f(x)]$  или  $J = \Phi[y]$ . Примером функционала может быть определённый интеграл от функции  $f(x)$  или от некоторого выражения, зависящего от  $f(x)$ ,

$$\Phi[y] = \int_a^b f(x) dx,$$

$$\Phi[y] = \int_a^b [f''(x) + p(x)f'(x) + q(x)f(x)] dx.$$

Если теперь функции  $u = f(x, y)$  ставится в соответствие по определённому правилу или закону вновь функция  $z = g(u)$ , то говорят, что задан оператор  $z = L(u)$  или  $z = Lu$ . Примерами дифференциальных операторов могут служить:

$$Lu = u'' + p(x, y)u' + q(x, y)u,$$

$$Lu = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}.$$

Дадим более строгое определение функционала. Пусть  $A$  – множество элементов произвольной природы, и пусть каждому элементу  $u \in A$  приведено в соответствие одно и только одно число  $J = \Phi[u]$ . В этом случае говорят, что на множестве  $A$  задан функционал  $\Phi[u]$ . Множество  $A$  называется областью определения функционала  $\Phi[u]$  и обозначается через  $D(J)$ ; число  $J$  называется значением функционала  $\Phi[u]$  на элементе  $u$ . Функционал  $\Phi[u]$  называется вещественным, если все его значения вещественны. Функционал  $\Phi[u]$  называется линейным, если его область определения есть линейное множество и если

$$\Phi[\alpha u + \beta v] = \alpha \cdot \Phi[u] + \beta \cdot \Phi[v].$$

## 1.2 Задачи, приводящие к экстремуму функционала

Зарождение вариационного исчисления относят обычно к 1696 году, когда И. Бернулли поставил так называемую задачу о брахистохроне: определить форму кривой, лежащей в вертикальной плоскости, по которой тяжёлая материальная точка, двигаясь под действием только одной силы тяжести и не имеющая начальной скорости, перейдёт из верхнего положения  $A$  в нижнее положение  $B$  за минимум времени, рисунок 1. Эта задача сводится к отысканию исходной функции  $y = f(x)$  – брахистохроны.

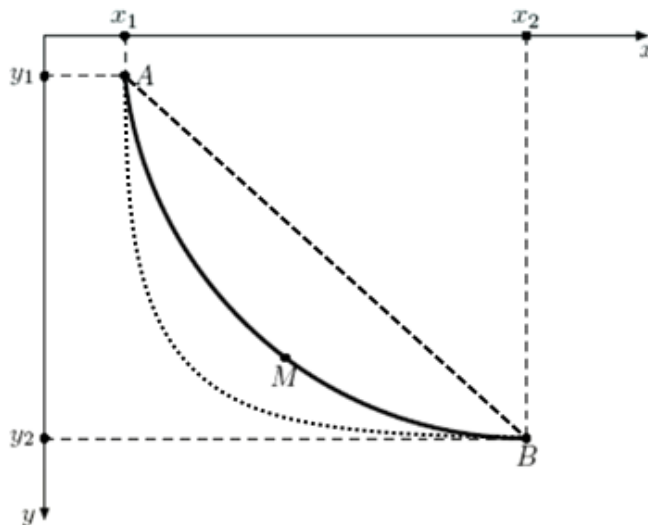


Рис. 1: Задача о брахистохроне

Пусть уравнение кривой  $AB$  есть  $y = f(x)$ . Рассмотрим некоторый момент времени  $t$ , и пусть в этот момент движущаяся точка находится на расстоянии  $y$  от оси  $x$ . Направим ось ординат вниз и сопоставим начальной точке нулевое значение ординаты. Из закона сохранения энергии для материальной точки имеем

$$\frac{mv^2}{2} = mgy.$$

Тогда  $v = \sqrt{2gy}$ , где  $v$  – скорость движущейся точки,  $g$  – ускорение свободного падения, а  $y$  – ордината точки. В то же время:

$$v = \frac{dS}{dt} = \sqrt{1 + (y')^2} \frac{dx}{dt},$$

отсюда следует, что

$$dt = \sqrt{\frac{1 + (y')^2}{2gy}} dx,$$

Обозначим через  $T$  время, в течение которого материальная точка достигает точки  $B$ . Интегрируя, находим

$$T = \frac{1}{\sqrt{2g}} \int_A^B \sqrt{\frac{1 + (y')^2}{y}} dx.$$

Задача сводится к следующему: надо найти функцию  $y = f(x)$ , удовлетворяющую условию  $f(A) = 0$ ,  $f(B) = C$  и сообщающую интегралу наименьшее значение. Условия означают, что искомая кривая должна проходить через заданные точки  $A$  и  $B$ . Такого типа условия принято называть граничными, или краевыми, так как они относятся к концам промежутка, на котором должна быть определена искомая функция.

**Информация:** Данная задача относится к ветви математического анализа, называемой вариационным исчислением. Примером применения кривой в виде брахистохроны служит образующая цилиндрических поверхностей, используемых на детских площадках, в аттракционах для спуска с возвышения, на трамплинах.

### 1.3 Первая вариация функционала

Задача вариационного исчисления состоит в следующем: дан функционал  $\Phi[u]$  с областью определения  $D(\Phi[u])$ ; требуется найти элемент  $u_0 \in D(\Phi[u])$ , сообщающий функционалу либо минимальное значение, либо максимальное. Задача о максимуме функционала  $\Phi[u]$  тождественна с задачей о минимуме функционала  $-\Phi[u]$ .

Будем рассматривать функционал  $\Phi[u]$ . Возьмём произвольный элемент  $u \in D(\Phi[u])$  и произвольный элемент  $\eta \in D(\Phi[u])$ . Обозначим через  $\alpha$  произвольное вещественное число. Нетрудно видеть, что элемент  $u + \alpha\eta \in D(\Phi[u])$ . Составим выражение  $\Phi[u + \alpha\eta]$ . Данное выражение есть непрерывно дифференцируемая функция от  $\alpha$ . Вычислим её производную и возьмём значение этой производной при  $\alpha = 0$ :

$$\frac{d\Phi[u + \alpha\eta]}{d\alpha}.$$

В результате получим число, которое можно рассматривать как значение функционала, зависящего от двух элементов  $u$  и  $\eta$ . Функционал

$$\frac{d\Phi[u + \alpha\eta]}{d\alpha} \cdot \alpha$$

называется первой вариацией функционала  $\Phi[u]$  на элементе  $u$  и обозначается символом  $\delta\Phi[u, \eta]$ :

$$\delta\Phi[u, \eta] = \frac{d\Phi[u + \alpha\eta]}{d\alpha} \cdot \alpha.$$

При этом разность двух функций  $u_1 \in D(\Phi[u])$  и  $u_2 \in D(\Phi[u])$  называют вариацией функции  $u$  и обозначают  $\delta u = u_1(x) - u_2(x)$ .

## 1.4 Необходимое условие минимума функционала

Пусть функционал  $\Phi[u]$  достигает на некотором элементе  $u_0$  относительного минимума. Возьмём произвольный элемент  $\eta \in D(\Phi[u])$  и произвольное вещественное число  $\alpha$ . По определению относительного минимума при достаточно малых значениях  $\alpha$

$$d\Phi[u_0 + \alpha\eta] \geq d\Phi[u_0].$$

Это неравенство означает, что функция одной вещественной переменной  $\alpha$ , равная  $d\Phi[u_0 + \alpha\eta]$ , имеет при  $\alpha = 0$  относительный минимум. Но тогда необходимо, чтобы  $\delta\Phi[u_0, \eta] = 0$ .



**Важно!** Если функционал в некоторой точке достигает минимума, то в этой точке первая вариация функционала равна нулю. В этом заключается необходимое условие экстремума функционала.

## 1.5 Уравнение Эйлера. Связь между вариационной и краевой задачами



**Базовая версия леммы Лагранжа.** Если непрерывная функция  $f(x)$  на открытом интервале  $(a, b)$  удовлетворяет равенству  $\int_a^b f(x) \cdot N(x) \cdot dx = 0$ , для всех финитных гладких функций  $N(x)$  на  $(a, b)$ , тогда  $f(x)$  является тождественным нулём.

Мы хотим найти такую функцию  $u = f(x)$ , которая удовлетворяет граничным условиям  $u(a) = A$ ,  $u(b) = B$  и доставляет экстремум функционалу

$$\Phi[u] = \int_a^b \mathcal{L}[x, u, u'] dx$$

Можем предположить, что подынтегральная функция  $\mathcal{L}[x, u, u']$  имеет непрерывные первые частные производные. Функция  $\mathcal{L}[x, u, u']$  называется функцией Лагранжа, или лагранжианом. Если  $u = f(x)$  даёт экстремум функционалу  $\Phi[u]$  и удовлетворяет граничным условиям, то любое слабое возмущение этой функции, которое сохраняет граничные условия, приведёт к увеличению значения  $J$  (если  $u$  минимизирует  $\Phi[u]$ ) или приведёт к уменьшению значения  $J$  (если  $u$  максимизирует  $\Phi[u]$ ). Пусть  $v = \eta(x)$  - любая дифференцируемая функция, удовлетворяющая условиям  $\eta(a) = 0$  и  $\eta(b) = 0$ . Определим

$$\Phi[\alpha] = \int_a^b \mathcal{L}[x, u + \alpha v, u' + \alpha v'] dx,$$

где  $\alpha$  - произвольный параметр.

Поскольку  $u$  даёт экстремум для  $\Phi[0]$ , то  $\Phi'[0] = 0$ , то есть

$$\Phi'[0] = \int_a^b \left[ \eta(x) \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u} + \eta'(x) \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u'} \right] dx = 0.$$

Интегрируя по частям второе слагаемое, находим, что

$$\int_a^b \left[ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u} + \frac{d}{dx} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u'} \right] \eta(x) dx + \eta(x) \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u'} \Big|_a^b = 0.$$

Используя граничные условия на  $\eta(x)$ , получим

$$\int_a^b \left[ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u} + \frac{d}{dx} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u'} \right] \eta(x) dx = 0.$$

Так как  $\eta(x)$  - любая, следует уравнение Эйлера-Лагранжа.

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u} + \frac{d}{dx} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u'} = 0. \quad (1)$$

Если не вводить граничные условия на  $u$ , то также требуется условия трансверсальности:

$$\frac{\partial \mathcal{L}[a, u(a), u'(a)]}{\partial u'} = 0,$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}[a, u(b), u'(b)]}{\partial u'} = 0.$$

Таким образом, условие минимума функционала при краевых условиях приводит к краевой задаче для уравнения Эйлера при тех же краевых условиях. Иными словами, существует тесная связь между вариационной задачей о минимуме функционала и краевой задачей для уравнения Эйлера для этого функционала.



**Важно!** Решения уравнения Эйлера для функционала, удовлетворяющие краевым условиям, называют экстремалами функционала. Условия трансверсальности определяют возможные ориентации касательных к экстремалам в точках их пересечения с граничными кривыми.

## 1.6 Пути решения вариационных задач

Один из путей решения вариационной задачи, то есть задачи нахождения минимума некоторого функционала  $\Phi[u]$  при заданных краевых условиях, состоит в сведении этой задачи к краевой задаче для дифференциального уравнения при тех же краевых условиях, которое является уравнением Эйлера для этого функционала, с последующим решением этой задачи.

Второй путь решения вариационной задачи состоит в применении прямых методов, которые позволяют приближённо найти функцию  $u_0$ , дающую минимум функционалу  $\Phi[u]$  и удовлетворяющую заданным краевым условиям.

Прежде чем перейти к прямым методам вариационного исчисления вернемся к задаче брахистохроны и попробуем её решить. Используя полученные знания о вариационном исчислении и функционалов сведём задачу к краевой задаче для дифференциального уравнения.

Вспомним, что за  $T$  мы обозначили время, за которое материальная точка достигает своего результирующего положения. В этом случае  $T$  является значением функционала

$$T = \Phi[y] = \frac{1}{\sqrt{2g}} \int_A^B \sqrt{\frac{1 + (y')^2}{y}} dx.$$

По условиям задачи необходимо определить такую функцию  $y$ , которая определяет минимальное время спуска. В таком случае подынтегральная функция имеет вид

$$F(x, y, y') = \sqrt{\frac{1 + (y')^2}{y}}$$

и притерпевает разрыв при  $y = 0$ . Однако, путем несложных рассуждений можно показать, что для этой функции всё-таки можно использовать уравнение Эйлера (1).

Подставляя данную функцию  $F(x, y, y')$  в уравнение Эйлера, получаем

$$\frac{d}{dx} \sqrt{y(1 + y'^2)} = 0.$$

Отсюда следует, что

$$\sqrt{y(1 + y'^2)} = k.$$

Учитывая, что  $k$  - константа, предположим, что  $y' = \tan(\theta)$ . Тогда

$$y = \frac{k}{1 + \tan^2(\theta)} = \frac{k}{2}(1 + \cos(2\theta)).$$

Дифференцируя это выражение, получим  $y' = -k \sin(2\theta)\theta'$ . Замена  $y' = \tan(\theta)$  дает дифференциальное уравнение относительно  $\theta'$

$$\frac{d\theta}{dx} = -\frac{\tan(\theta)}{k \sin(2\theta)}.$$

Решая данное дифференциальное уравнение, учитывая граничные условия  $y(A) = 0$  и  $y(B) = C$ , получим

$$x = C - \frac{k}{2}(\theta - \sin(\theta)),$$

$$y = \frac{k}{2}(1 - \cos(\theta)).$$

Таким образом, если задача о брахистохроне имеет решение, то это решение есть циклоида.

## 2 Прямые методы вариационного исчисления

Основным вопросом, возникающим в связи с любой вариационной проблемой, является вопрос о существовании решения. Классические методы вариационного исчисления приводят этот вопрос в первую очередь к вопросу о существовании решения дифференциального уравнения. При этом ищется решение не в окрестности какой-либо точки, а во всей области - при определённых краевых условиях (решение в целом). Доказательство существования таких решений теория дифференциальных уравнений даёт лишь в редких случаях. Это обстоятельство заставило искать другие подходы к вариационным проблемам и привело к созданию так называемых прямых методов.

Прямые методы вариационного исчисления оказались полезными и для теории дифференциальных уравнений. Действительно, если некоторое дифференциальное уравнение можно рассматривать, как уравнение Эйлера для некоторого функционала и если каким-то приёмом установлено, что этот функционал имеет экстремум в классе достаточно число раз дифференцируемых функций, то тем самым доказано, что исходное дифференциальное уравнение имеет решение в целом при рассматриваемых краевых условиях. Так как прямой метод состоит в построении последовательности функций, сходящейся к искомой функции, то с помощью прямого метода не только устанавливается существование решения в целом, но и даётся некоторый способ для приближённого построения этого решения.

### 2.1 Метод Ритца

Одним из важнейших практических методов для построения минимизирующих последовательностей является метод, который предложил в 1908 году Вальтер Ритц — швейцарский физик-теоретик и математик.

Метод состоит в следующем — вычисляется  $n$ -ое приближение к минимизируемой функции  $u(x)$  в виде

$$\varphi_n(x) = \sum_{i=0}^n \alpha_i N_i(x). \quad (2)$$

Здесь значение функционала  $\Phi[u]$  рассматривается не на произвольных допустимых кривых данной вариационной задачи, а лишь на всевозможных линейных комбинациях с постоянными коэффициентами. Коэффициенты составлены из  $n$  первых функций некоторой выбранной последовательности функций

$$N_1(x), N_2(x), N_3(x), \dots, N_n(x).$$

❶

**Информация:** Данные функции часто называют координатными, базисными или финитными. Быстрота сходимости метода Ритца сильно зависит от выбора системы базисных функций. Однако при удачном выборе (для достижения приемлемой точности) часто бывает достаточно трёх или четырёх слагаемых в линейной комбинации. Базисом может быть огромное число различных функций: как собственные функции задачи Штурма-Лиувилля, так и более простые системы кусочно-линейных функций. Явного обсуждения выбора базисных функций мы не коснёмся, так как на эту тему уже написано несколько десятков книг.

На линейных комбинациях функционал  $\Phi[u]$  превращается в функцию  $\varphi_n(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$  коэффициентов  $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ . Эти коэффициенты выбираются так, чтобы функция  $\varphi_n(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$  достигала экстремум. Следовательно,  $\alpha_1, \dots, \alpha_n$  должны быть определены из условий стационарности, то есть из системы

$$\frac{dN_i}{d\alpha_i} = 0, \quad i = 1, \dots, n.$$

Получившаяся в результате последовательность функций сходится к минимуму по функционалу. Заканчивая процесс вычислений, получают значение  $\Phi[\varphi]$ , приближённо равное глобальному минимуму (при этом сама функция  $\varphi$  может сильно отличаться от оптимальной).

На практике последовательность финитных функций  $\{\varphi_n\}$  обычно строят с помощью системы многочленов  $1, x, x^2, x^3, \dots, x^n$  или системы тригонометрических функций  $\sin(x), \sin(2x), \sin(3x), \dots, \sin(nx)$ . Обе системы являются полными в пространстве непрерывных функций.

### 2.2 Теория применения метода Ритца для решения вариационных задач

Очень часто при математическом моделировании физических процессов требуется найти решение краевой задачи для линейного дифференциального уравнения второго порядка. В общем случае для такого уравнения можем записать

$$\frac{d}{dx} \left( p(x) \frac{du}{dx} \right) - q(x)u = -f(x), \quad (3)$$

при условиях, что  $p(x) > 0 \forall x \in [a, b]$  и граничными условиями первого, второго и третьего рода. Для данной задачи можно дать эквивалентную вариационную формулировку и далее решить методом Ритца. Рассмотрим набор из трёх представлений данной краевой задачи в вариационной постановке.

### 2.2.1 Краевая задача Дирихле (1-го рода)

Дифференциальное уравнение с граничными условиями имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \left( p(x) \frac{du}{dx} \right) - q(x)u &= -f(x); \\ u(a) &= \gamma_1, \quad u(b) = \gamma_2. \end{aligned} \quad (4)$$

Тогда, вариационная постановка данной задачи примет вид

$$\begin{aligned} \Phi[u] &= \frac{1}{2} \int_a^b (p(x)u'^2 + q(x)u^2 - 2f(x)u) dx \rightarrow \min; \\ u(a) &= \gamma_1, \quad u(b) = \gamma_2. \end{aligned}$$

Граничные условия (4) будут удовлетворены вследствие того, что минимум функционала ищется на множестве  $\Omega = \{u(x) \in C_1[a, b] \mid u(a) = \gamma_1, u(b) = \gamma_2\}$ . Следует заметить, что в общем случае минимум будет достигнут при  $q(x) \geq 0$ , а при  $q(x) < 0$  его может не быть, а значит можно лишь говорить о стационарном значении функционала.

В случае задачи Дирихле требуется решить простейшую задачу вариационного исчисления.

### 2.2.2 Краевая задача Неймана (2-го рода)

Дифференциальное уравнение с граничными условиями имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \left( p(x) \frac{du}{dx} \right) - q(x)u &= -f(x); \\ u'(a) &= \rho_1, \quad u'(b) = \rho_2. \end{aligned} \quad (5)$$

Тогда, вариационная постановка данной задачи примет вид

$$\Phi[u] = \frac{1}{2} \int_a^b (p(x)u'^2 + q(x)u^2 - 2f(x)u) dx + \rho_1 p(a)u(a) - \rho_2 p(b)u(b) \rightarrow \min.$$



**Информация:** Так как в выражении функционала есть граничные значения функции, данная задача называется вариационной задачей Больца.

### 2.2.3 Смешанная краевая задача (3-го рода)

Дифференциальное уравнение с граничными условиями имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \left( p(x) \frac{du}{dx} \right) - q(x)u &= -f(x); \\ u'(a) + \xi_1 u(a) &= \eta_1, \quad u'(b) + \xi_2 u(b) = \eta_2. \end{aligned} \quad (6)$$

Тогда, вариационная постановка данной задачи примет вид задачи Больца

$$\Phi[u] = \frac{1}{2} \int_a^b (p(x)u'^2 - q(x)u^2 + 2f(x)u) dx - \frac{1}{2}\xi_1 p(a)u^2(a) + \eta_1 p(a)u(a) + \frac{1}{2}\xi_2 p(b)u^2(b) - \eta_2 p(b)u(b) \rightarrow \min.$$

В случае последних двух типов задач 2-го и 3-го рода, множество функций, на котором ищется минимум функционала, ограничено только функциями  $u(x) \in C_1[a, b]$ , которые априори не удовлетворяют каким-либо граничным условиям.

**Важно!** Функция  $u(x)$ , доставляющая экстремум функционалу на множестве всех допустимых функций, будет автоматически удовлетворять как дифференциальному уравнению, так заданным граничным условиям. Такие условия называются *естественными*. В отличие от *главных* в вариационном эквиваленте задачи Дирихле.

#### 2.2.4 Выбор аппроксимации неизвестной функции

В силу естественности граничных условий аппроксимация неизвестной функции (2) может выбираться без ограничений на границе. В методе Ритца обычно  $u(x)$  записывают в виде разложения по системе линейно независимых функций  $\{1, x, x^2, x^3, \dots\}$ . Например, в виде полного многочлена с неопределенными коэффициентами

$$u(x) \approx \varphi_n(x) = \alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 x^2 + \dots + \alpha_n x^{n-1}.$$

Разумеется, в смешанной задаче, когда присутствуют одновременно и главные, и естественные условия, аппроксимация должна обеспечивать выполнение граничного условия 1-го рода, записанного для соответствующей точки (как в простейшей задаче). Например, если в точке  $x = a$  выполняется условие  $u(a) = \gamma_1$ , а в точке  $x = b$  - условие типа  $u'(b) + \xi u(b) = \eta$ , то аппроксимация может быть взята в виде

$$\varphi_n(x) = u_0 + (\alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 x^2 + \dots + \alpha_n x^{n-1})(x - a),$$

а функционал не будет содержать граничных слагаемых, вычисляемых в точке  $x = a$ :

$$\Phi[u] = \frac{1}{2} \int_a^b (p(x)u'^2 - q(x)u^2 + 2f(x)u) dx + \frac{1}{2} \xi p(b)u^2(b) - \eta p(b)u(b).$$

Если решается краевая задача 1-го рода, в которой граничные условия главные, приближение, на котором минимизируется функционал, чаще всего берут в виде

$$\varphi_n(x) = \frac{\gamma_2 - \gamma_1}{b - a} + \gamma_1 + (x - a)(x - b) \sum_i \alpha_i x^{i-1}.$$

**Важно!** Необходимо убедиться, что оба условия  $u(a) = \gamma_1$  и  $u(b) = \gamma_2$  выполняются здесь априори.

### 2.3 Практика применения метода Ритца для решения вариационных задач

Имеем линейное дифференциальное уравнение 2-го порядка:

$$\frac{d}{dx} \left( x^2 \frac{du}{dx} \right) - 2u = -1 - \ln x^2.$$

Граничные условия, которого:

$$A) u'(1) = 0, u(2) = 1;$$

$$B) u(1) = 0, u(2) + u'(2) = 1.$$

Решая исходное линейное дифференциальное уравнение получим общее решение дифференциального уравнения в виде:

$$u(x) = \frac{C_2}{x^2} + C_1 x + \frac{\ln x^2}{2} + 1$$

$$u'(x) = -\frac{2C_2}{x^3} + C_1 + \frac{1}{x}.$$

Пользуясь граничными условиями составим системы уравнений из которых определим неизвестные коэффициенты и составим таблицу 1. Исходные функции принимают вид

$$A) u_0(x) = \frac{0.307494781044718}{x^2} - 0.385010437910562x + \frac{\ln x^2}{2} + 1,$$



$$B) u_0(x) = -\frac{0.602284273146684}{x^2} - 0.397715726853315x + \frac{\ln x^2}{2} + 1.$$

Данные кривые будут единственными кривыми возможного экстремума функционала с данными граничными условиями (см. приложение А).

Граничные условия	Коэффициенты	Точные значения коэффициентов
$u'(1) = 0$ $u(2) = 1$	$C_1 = -\frac{1}{17} - \frac{8}{17} \ln 2$ $C_2 = \frac{8}{17} - \frac{4}{17} \ln 2$	$C_1 = -0.385010437910562$ $C_2 = 0.307494781044718$
$\varphi(1) = 0$ $\varphi(2) + \varphi'(2) = 1$	$C_1 = -\frac{1}{3} \ln 2 - \frac{1}{6}$ $C_2 = \frac{1}{3} \ln 2 - \frac{5}{6}$	$C_1 = -0.397715726853315$ $C_2 = -0.602284273146684$

Таблица 1: Точные коэффициенты

### 2.3.1 Решение краевой задачи Дирихле (1-го рода)

Данную задачу также называют – простейшей вариационной задачей. В задаче требуется найти функцию  $u_0$ , доставляющую экстремум функционалу

$$\Phi[u] = \int_a^b F(x, u, u') dx,$$

при условиях  $u(a) = A$  и  $u(b) = B$ .

Если граничные условия однородны, то есть  $u(a) = u(b) = 0$ , то проще всего в качестве базисных функций выбрать функции, удовлетворяющие этим условиям:  $N_i(a) = N_i(b) = 0$ ,  $n = 1, 2, \dots, m$ . Например:

$$N_i(x) = (x - a)(x - b)w_i(x),$$

где  $w_i(x)$  – какие-нибудь непрерывные функции. Очевидно, что при этом и аппроксимация

$$\varphi_n(x) = \sum_{i=0}^n \alpha_i N_i(x)$$

при любых  $\alpha_i$  будет удовлетворять граничным условиям.

Если условия неоднородны, например  $u(a) = A$  и  $u(b) = B$ , где хотя бы одно из чисел  $A$  или  $B$  отлично от нуля, то решение вариационной задачи нужно искать в виде

$$\varphi_n(x) = \sum_{i=0}^n \alpha_i N_i(x) + \psi(x), \quad (7)$$

причём  $\psi(x)$  удовлетворяет заданным граничным условиям  $\psi(a) = A$ ,  $\psi(b) = B$ .

### 2.3.2 Решение краевой задачи Неймана (2-го рода)

Имеем линейное дифференциальное уравнение 2-го порядка:

$$\frac{d}{dx} \left( x^2 \frac{du}{dx} \right) - 2u = -1 - \ln x^2.$$

Граничные условия, которого:

$$u'(1) = 0, \quad u(2) = 1.$$

Исходная задача эквивалентна нахождению функции  $u_0$ , удовлетворяющей граничным (краевым) условиям и минимизирующую функционал

$$\Phi[u] = \int_a^b F(x, u, u') dx + g(u(a), u(b)),$$

где  $g(u(a), u(b))$  – заданная функция, имеющая непрерывные производные по  $u(a)$  и  $u(b)$ .

Для граничных условий  $u'(1) = 0$ ,  $u(2) = 1$  задача эквивалентна частному случаю краевой задачи Неймана (2-го рода). Общий вид которой:

$$\Phi[u] = \frac{1}{2} \int_a^b \left[ \frac{d}{dx} \left( p(x) \frac{du}{dx} \right) - q(x)u \right] dx - \gamma_1 p(a)u(a) + \gamma_2 p(b)u(b).$$

Условия экстремума:

$$\frac{d}{dx} \left( p(x) \frac{du}{dx} \right) - q(x)u = -f(x)$$

и граничные условия

$$u'(a) = \gamma_1, \quad u(b) = \gamma_2.$$

Для того чтобы функционал достигал на функции экстремума, необходимо, чтобы эта функция удовлетворяла уравнению Эйлера и условиям трансверсальности. Функция, которую в дальнейшем необходимо будет подставить в функционал, должна иметь вид

$$F(x, u, u') = \frac{x^2}{2} u'^2 + u^2 - (1 + \ln x^2)u, \quad (8)$$

$$g(u(a)) = 0.$$

Проверим, удовлетворяет ли функция уравнению Эйлера и условиям трансверсальности.

Во-первых, подставим функцию (8) в общий вид уравнения Эйлера (1) и попытаемся получить исходную форму.

$$\frac{\partial F}{\partial u} - \frac{d}{dx} \frac{\partial F}{\partial u'} = 0;$$

$$2u - (1 + \ln x^2) - \frac{d}{dx} (x^2 u') = 0;$$

$$\frac{d}{dx} (x^2 u') - 2u = -1 - \ln(x^2).$$

Во-вторых, проверим условия трансверсальности:

$$\left[ \frac{\partial F}{\partial u'} - \frac{\partial g}{\partial u(a)} \right]_{x=a} = 0;$$

$$u'(1) = 0.$$

Оба условия соблюдены, поэтому запишем задачу в вариационной формулировке:

$$\Phi[u] = \int_1^2 \left[ \frac{x^2}{2} u'^2 + u^2 - (1 + \ln x^2)u \right] dx. \quad (9)$$

Имеем одну фиксированную точку  $P(2)$ , а другую  $P(1)$  – подвижную. Для первой должно выполняться условие  $u(2) = 1$ , а для второй точки – условие  $u'(1) = 0$  как условие трансверсальности. Последнее будет выполняться автоматически, реализуя условия минимума функционала. Поэтому в соответствии с (7), в данном случае  $\psi(x) = 1$ , а в качестве  $\{N_i\}$  – любые линейно независимые функции, равные нулю при  $x = 2$ .

$$u_0(x) \approx \varphi_{[n]}(x) = (\alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 x^2 + \dots + \alpha_n x^{n-1})(x - 2) + 1.$$

Положим  $n = 3$

$$\varphi_{[3]}(x) = (\alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 x^2)(x - 2) + 1.$$

Подставим функцию  $\varphi_{[3]}(x)$  в функционал  $\Phi[u]$  (9), интегрируя, получим функцию  $\Psi(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ , зависящую от неизвестных коэффициентов, но уже не зависящую от  $x$ .

$$\Psi(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = \frac{11}{3} \alpha_1 \alpha_2 - \frac{19}{9} \alpha_2^2 - \frac{155}{72} \alpha_3 - \ln 16 - 3\alpha_1 + \frac{14}{3} \alpha_1 \alpha_3 + \frac{38}{5} \alpha_2 \alpha_3 + \alpha_1 \ln 16.$$

Решим задачу минимизации функции трёх переменных для  $\Psi(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \alpha_1} = 0, \quad \frac{\partial \Psi}{\partial \alpha_2} = 0, \quad \frac{\partial \Psi}{\partial \alpha_3} = 0.$$

Получим систему из трёх уравнений с тремя неизвестными

$$\begin{cases} 3\alpha_1 + \frac{11}{3}\alpha_2 + \frac{14}{3}\alpha_3 + \ln 16 - 3 = 0 \\ \frac{11}{3}\alpha_1 + \frac{26}{5}\alpha_2 + \frac{38}{5}\alpha_3 + \ln 4 \cdot 2^{\frac{2}{3}} - \frac{19}{9} = 0 \\ \frac{14}{3}\alpha_1 + \frac{38}{5}\alpha_2 + \frac{433}{35}\alpha_3 + \ln 4 \cdot 2^{\frac{2}{3}} - \frac{155}{72} = 0. \end{cases}$$

Решая данную систему, мы находим неизвестные коэффициенты

$$\alpha_1 = \frac{24851}{876} - \frac{2992}{73} \ln 2 = -0.040817774913557,$$

$$\alpha_2 = -\frac{3010}{73} + \frac{4364}{73} \ln 2 = -0.204031451556182,$$

$$\alpha_3 = \frac{8645}{584} - \frac{1568}{73} \ln 2 = -0.085339439972523.$$

Таким образом, приближенное решение данной задачи имеет вид (см. приложение Б)

$$\varphi_{[3]} = (-0.040817774913557 + 0.204031451556182x - 0.085339439972523906387x^2)(x - 2) + 1.$$

Процесс сходимости и точность решения отражены в таблице 2.

$x$	1.0	1.25	1.5	1.75	2.0	$J = \Phi[...]$	$\ \varphi_{[n]} - u_0\ $
$\varphi_{[2]}(x)$	0.919486	0.943589	0.965042	0.983846	1.0	-0.7813694156	0.02737674162
$\varphi_{[3]}(x)$	0.922126	0.939341	0.963392	0.986279	1.0	-0.7817609074	0.00946810176
$\varphi_{[4]}(x)$	0.922457	0.938455	0.964549	0.986425	1.0	-0.7818337295	0.00262807040
$u_0(x)$	0.922484	0.938677	0.964613	0.986253	1.0	-0.7818408301	0

Таблица 2: Сходимость и точность решения

### 2.3.3 Решение смешанной краевой задачи (3-го рода)

Имеем линейное дифференциальное уравнение 2-го порядка:

$$\frac{d}{dx} \left( x^2 \frac{du}{dx} \right) - 2u = -1 - \ln x^2.$$

Граничные условия, которого:

$$u(1) = 0, \quad u(2) + u'(2) = 1.$$

Исходная задача эквивалентна нахождению функции  $u_0(x)$ , удовлетворяющей граничным (краевым) условиям и минимизирующую функционал

$$\Phi[u] = \int_a^b F(x, u, u') dx + g(u(a), u(b)),$$

где  $g(u(a), u(b))$  – заданная функция, имеющая непрерывные производные по  $u(a)$  и  $u(b)$ .

Для граничных условий  $u(1) = 0, u(2) + u'(2) = 1$  задача эквивалентна частному случаю смешанной краевой задачи (3-го рода). Общий вид которой:

$$\Phi[u] = \frac{1}{2} \int_a^b [p(x)u'^2 + u^2 - 2q(x)u] dx - \frac{1}{2}\beta_1 p(a)u^2(a) + \gamma_1 p(a)u(a) + \frac{1}{2}\beta_2 p(b)u^2(b) - \gamma_2 p(b)u(b).$$

Условия экстремума:

$$\frac{d}{dx} \left( p(x) \frac{du}{dx} \right) - q(x)u = -f(x)$$

и граничные условия  $u'(a) + \beta_1 u(a) = \gamma_1, u'(b) + \beta_2 u(b) = \gamma_2$ .

Для того чтобы функционал достигал на функции экстремума, необходимо, чтобы эта функция удовлетворяла уравнению Эйлера и условиям трансверсальности. Функция, которую в дальнейшем необходимо будет подставить в функционал, должна иметь вид

$$F(x, u, u') = \frac{x^2}{2} u'^2 - u^2 + (1 + \ln(x^2))u, \quad (10)$$

$$g(u(b)) = 2u^2(2) - 4u(2).$$

Проверим, удовлетворяет ли функция уравнению Эйлера и условиям трансверсальности.

Во-первых, подставим функцию (10) в общий вид уравнения Эйлера (1):

$$\frac{\partial F}{\partial u} - \frac{d}{dx} \frac{\partial F}{\partial u'} = 0;$$

$$2u - (1 + \ln(x^2)) - \frac{d}{dx}(x^2 u') = 0;$$

$$\frac{d}{dx}(x^2 u') - 2u = -1 - \ln(x^2).$$

Во-вторых, проверим условия трансверсальности:

$$\left[ \frac{\partial F}{\partial u'} + \frac{\partial g}{\partial u(b)} \right]_{x=b} = 0;$$

$$4u' + 4u - 4 = 0;$$

$$u'(2) + u(2) = 1.$$

Запишем исходную задачу в вариационной формулировке:

$$\Phi[u] = \int_1^2 \left[ \frac{x^2}{2} u'^2 + u^2 - (1 + \ln x^2 u) \right] dx + 2u^2(2) - 4u(2). \quad (11)$$

Имеем одну фиксированную точку  $P(2)$ , а другую  $P(1)$  – подвижную. Для первой должно выполняться условие  $u(1) = 0$ , а для второй точки – условие  $u(2) + u'(2) = 1$  как условие трансверсальности. Последнее будет выполняться автоматически, реализуя условия минимума функционала. Поэтому в соответствии с (7), в данном случае  $\psi(x) = 0$ , а в качестве  $\{N_i\}$  – любые линейно независимые функции, равные нулю при  $x = 1$ .

$$u_0(x) \approx \varphi_n(x) = (\alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 x^2 + \dots + \alpha_n x^{n-1})(x - 2) + 1.$$

Положим  $n = 3$

$$\varphi_{[3]}(x) = (\alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 x^2)(x - 2) + 1.$$

Подставим функцию  $\varphi_{[3]}(x)$  в функционал  $\Phi[u]$  (11), интегрируя, получим функцию  $\Psi(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ , зависящую от неизвестных коэффициентов, но уже не зависящую от  $x$ .

$$\begin{aligned} \Psi(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = & \frac{19}{3} \alpha_1 \alpha_2 - \frac{79}{9} \alpha_2 - \frac{1231}{72} \alpha_3 - 5\alpha_1 + \frac{79}{6} \alpha_1 \alpha_3 + \frac{154}{5} \alpha_2 \alpha_3 + 2(\alpha_1 + 2\alpha_2 + 4\alpha_3)^2 + \\ & + \frac{3}{2} \alpha_1^2 + \frac{71}{10} \alpha_2^2 + \frac{2407}{70} \alpha_3^2 + \alpha_2 \ln \frac{2^{\frac{2}{3}}}{4} - \alpha_3 \ln 4 \cdot 2^{\frac{2}{3}}. \end{aligned}$$

Решим задачу минимизации функции трёх переменных для  $\Psi(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \alpha_1} = 0, \quad \frac{\partial \Psi}{\partial \alpha_2} = 0, \quad \frac{\partial \Psi}{\partial \alpha_3} = 0.$$

Получим систему из трёх уравнений с тремя неизвестными

$$\begin{cases} 7\alpha_1 + \frac{43}{3}\alpha_2 + \frac{175}{6}\alpha_3 - 5 = 0 \\ \frac{43}{3}\alpha_1 + \frac{151}{5}\alpha_2 + \frac{314}{5}\alpha_3 + \ln \frac{1}{4} \cdot 2^{\frac{2}{3}} - \frac{79}{9} = 0 \\ \frac{175}{6}\alpha_1 + \frac{314}{5}\alpha_2 + \frac{4647}{35}\alpha_3 + \log 4 \cdot 2^{\frac{2}{3}} - \frac{1231}{72} = 0 \end{cases}$$

Решая данную систему, мы находим неизвестные коэффициенты

$$\alpha_1 = \frac{493099}{9876} - \frac{55088}{823} \ln 2 = 3.532796416339083$$

$$\alpha_2 = -\frac{173591}{3292} + \frac{59836}{823} \ln 2 = -2.336081778876199$$

$$\alpha_3 = \frac{11606}{823} - \frac{16184}{823} \ln 2 = 0.471574762840638$$

Таким образом, приближенное решение данной задачи имеет вид (см. приложение В)

$$\varphi_{[3]}(x) = (3.532796416339083 - 2.336081778876199x + 0.471574762840638x^2)(x - 1).$$

Процесс сходимости и точность решения отражены в таблице 3.

$x$	1.0	1.25	1.5	1.75	2.0	$J = \Phi[...]$	$\ \varphi_{[n]} - u_0\ $
$\varphi_{[2]}(x)$	0	0.304225	0.529682	0.676371	0.744292	-1.954630663	0.02056217267
$\varphi_{[3]}(x)$	0	0.337382	0.544858	0.666638	0.746932	-1.966825559	0.00331818248
$\varphi_{[4]}(x)$	0	0.341084	0.541376	0.666441	0.747131	-1.967792510	0.00060124038
$u_0(x)$	0	0.340536	0.541209	0.666949	0.747144	-1.967867957	0

Таблица 3: Сходимость и точность решения

## Заключение

Современному инженеру часто приходится иметь дело с задачами, которые требуют от него хорошей математической подготовки и твёрдых навыков в применении разнообразных математических методов. Расширение математического кругозора инженеров немало способствует новым достижениям техники.

Вариационное исчисление – один из наиболее важных для приложений разделов классического математического анализа. Вариационное исчисление является быстро развивающимся разделом математического анализа, охватить который с достаточной полнотой в монографии небольшого объёма невозможно. Данному разделу математического анализа посвящено большое количество книг, таких как:

- Эльсгольц Л. Э. Дифференциальные уравнения и вариационное исчисление / Эльсгольц Л. Э. – М.: Наука, 1969;
- Канторович Л. В. Вариационное исчисление / Канторович Л. В., Крылов В. И., Смирнов В. И. – М.: Кубуч, 1933;
- Гельфанд И. М. Вариационное исчисление / Гельфанд И. М., Фомин С. В. – М.: Наука. 1961;
- Кострюков С. А. Основы вариационного исчисления / Кострюков С. А., Пешков В. В., Шунин Г. Е. – учеб. пособие. Воронеж. ВГТУ, 2011;
- Краснов М. Л. Вариационное исчисление, задачи и упражнения / Краснов М. Л., Макаренко Г. И., Киселев А. И. — М.: Наука, 1973.

Стоп, стоп, стоп... А как же МКЭ, матрица жёсткости в кусочно-линейном пространстве, функционал-энергии, собственные значения дискретизированного гамильтониана в квантовой механике?! Не переживайте, всё есть в приложении Г. Кроме того, вы узнаете, что всё-таки метод Рэлея-Ритца не сильно отличается от классического метода Ритца.

## Приложение А

## Приложение Б



## Приложение В

## Приложение Г



**ВНИМАНИЕ!** Вариационное исчисление способно вызвать головокружение или чрезмерную сонливость. Побочные эффекты от длительного воздействия могут включать в себя: ночную потливость, приступы паники и в редких случаях эйфорию. Прежде чем приступать к их изучению, проконсультируйтесь с врачом.

### Вопрос 1

Причём здесь метод конечных элементов?

Если мы запишем упругие смещения, вызванные приложенными нагрузками, в вариационной формулировке, мы получим

$$u = \sum_{i=1}^n \alpha_i N_i(x, y, z),$$

$$v = \sum_{i=1}^n \beta_i M_i(x, y, z),$$

$$w = \sum_{i=1}^n \gamma_i O_i(x, y, z).$$

Здесь  $N_i, M_i, O_i$  - заранее выбранные финитные функции, а  $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i$  - неизвестные коэффициенты, которые могут быть определены из условий минимума полной потенциальной энергии системы.

Главной трудностью при использовании прямых вариационных методов является выбор финитных функций  $N_i, M_i, O_i$ . Разумеется, что с увеличением числа финитных функций точность решения повышается, однако учёт локальных особенностей геометрии и напряжённого состояния в них (то есть уточнение концентраторов напряжений) остаётся весьма трудным.

В методе конечных элементов область поиска решения разбивается на малые конечные области. Аппроксимация функций  $u, v, w$  проводится в каждой области (конечном элементе) отдельно. Этот подход позволяет принять за неизвестные смещения в узловых точках, сопрягающих отдельные области.

Подобный подход позволяет использовать простейшие финитные функции, такие как линейные или квадратичные функции координат. Далее как и в прямых вариационных методах, для получения разрешающей системы уравнений относительно неизвестных смещений узлов можно использовать начало возможных перемещений:

$$\iiint_V \{\delta \varepsilon\}^T \{\sigma\} dV - \iiint_V \{\delta u\}^T \{F\} dV - \iint_S \{\delta u\}^T \{p\} dS = 0.$$

С точки зрения вычислительной математики, идея метода конечных элементов заключается в том, что минимизация функционала для вариационной задачи производится на наборе простых финитных функций, каждая из которых определена в локальных подобластях. Если использовать более грубую формализацию, то метод конечных элементов можно рассматривать как один из вариантов метода Ритца.

## Вопрос 2

А как быть с матрицей жёсткости?

Функция аппроксимации в методе Ритца представляет собой линейную комбинацию из  $N$  известных финитных функций  $\{N_i\}$ , параметризованную неизвестными коэффициентами  $c_i$

$$\Phi = \sum_{i=1}^N c_i N_i.$$

Так как всегда можно показать, что энергия основного состояния  $E_0$ , удовлетворяет неравенству

$$E_0 \leq \frac{\langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle}.$$

Иными словами энергия основного состояния меньше этого значения. Пробная функция всегда будет давать математическое ожидание больше или равное основной энергии.

Имея известный гамильтониан  $\hat{H}$ , можно записать его математическое ожидание в виде

$$E = \frac{\left\langle \sum_{i=1}^N c_i N_i \left| \hat{H} \right| \sum_{i=1}^N c_i N_i \right\rangle}{\left\langle \sum_{i=1}^N c_i N_i \left| \sum_{i=1}^N c_i N_i \right\rangle} = \frac{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N c_i^* c_j H_{ij}}{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N c_i^* c_j S_{ij}} \equiv \frac{A}{B}.$$

Финитные функции обычно не ортогональны, поэтому квадратная матрица перекрытия  $S_{ij}$  будет иметь ненулевые недиагональные элементы. Либо набор  $\{c_i\}$ , либо  $\{c_i^*\}$  можно использовать для минимизации математического ожидания.

Например, для любого  $k = 1, 2, \dots, N$  частная производная  $\partial E / \partial c_k^*$  становится равенством

$$\frac{\partial E}{\partial c_k^*} = \frac{\sum_{j=1}^N c_j (H_{kj} - E S_{kj})}{B} = 0,$$

которое приводит к системе из  $N$  характеристических уравнений

$$\sum_{j=1}^N c_j (H_{kj} - E S_{kj}) = 0,$$

для каждого  $k$ . Здесь  $E$  - энергия,  $\{c_j\}$  - неизвестные коэффициенты.

На языке метода конечных элементов матрица  $H_{kj}$  в точности является матрицей жёсткости гамильтониана  $\hat{H}$  в кусочно-линейном пространстве элементов. Матрица  $S_{kj}$  - матрица масс. На языке линейной алгебры значение  $E$  - собственное значение дискретизированного гамильтониана, а вектор - дискретизированный собственный вектор.



**Информация:** Используемая в квантовой химии матрица перекрытия  $S_{ij}$  используется для описания взаимосвязи набора базисных векторов квантовой системы.

### Вопрос 3

Я очень хочу решить какое-нибудь обыкновенное дифференциальное уравнение методом Ритца, но у меня не хватает математической подготовки. Как мне быть?

Рекомендую воспользоваться любой системой компьютерной математики, например Maplesoft Maple®. Попробуем решить краевую задачу методом Ритца для уравнения

$$\frac{d}{dx} \left( x^2 \frac{du}{dx} \right) - 2u = -1 - \frac{2}{x}; \quad u(1) = 0, \quad u'(2) = 1.$$

Сначала найдем эквивалентную вариационную формулировку данной задачи. Сравнивая уравнение (3) с нашим уравнением, получаем, что  $p(x) = x^2$ ,  $q(x) = 2$ ,  $f(x) = 1 + 2/x$ . Аналогично из вида граничного условия  $u'(2) + \xi_2 u(2) = \eta_2$  находим  $\xi_2 = 0$ ,  $\eta_2 = 1$ . Граничное условие при  $x = 1$  (1-го рода) является главным. Таким образом, можем построить функционал

$$\Phi[u] = \frac{1}{2} \int_1^2 \left[ x^2 u'^2 + 2u^2 - 2 \left( 1 + \frac{2}{x} \right) u \right] dx - 4u(2).$$

Выберем аппроксимирующие функции. Они должны быть такими, чтобы при любых значениях параметров  $\{\alpha_i\}$  удовлетворяли главному граничному условию  $u(1) = 0$ :

$$\varphi_n(x) = (\alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 x^2 + \dots + \alpha_n x^{n-1})(x - 1).$$

Определив условия и требования, решим задачу с помощью системы компьютерной математики.

#### Maple Code

```
# 1. Очистка ОЗУ
restart;

# 2. Возьмём четыре параметра аппроксимации, положим n = 4
phi_n := x -> ((a1 + a2*x + a3*x^2 + a4*x^3) * (1 - x));

# 3. Вычислим функционал от этой функции
F := phi_n -> (1/2.)*int(x^2 * diff(phi_n(x), x)^2 + 2*phi_n(x)^2
- 2*(1 + 2*1/x)*phi_n(x), x = 1..2) - 4*phi_n(2);

# 4. Формируем функцию многих переменных, превращая в неё функционал
P := F(phi_n);

# 5. Производим поиск минимума функционала, как функции многих переменных.
# Формируем систему алгебраических уравнений из условия экстремума dF/dai = 0
eqSys := {diff(P, a1) = 0, diff(P, a2) = 0, diff(P, a3) = 0, diff(P, a4) = 0};

# 6. Решаем полученную СЛАУ
rs := solve(eqSys, {a1, a2, a3, a4});

# 7. Представим корни СЛАУ в числовом формате
numRoots := evalf(rs);

# 8. Оформим решение задачи в виде новой функции
phi := unapply(subs(numRoots, phi_n(x)), x);
```

#### Вопрос 4

Можно ли представить решение таблично или графически?

Да, конечно можно. Добавим в представленный выше код такие строки:

##### Maple Code

```
# 9. Обратимся к решению функции, для получения значения в точке  $x = 1.25$ 
phi(1.25);

# 10. Протабулируем эту функцию на отрезке  $x = [1, 2]$  с шагом 0.25
for t from 1 by 0.25 to 2 do printf("x=%g phi=%g\n", t, phi(t)); od;

# 11. Построим график функции
plot(phi(x), x = 1..2);
```



#### ВНИМАНИЕ! Важные нюансы применения системы Maple.

Замечание 1. В ряде случаев Maple может некорректно выводить функционал, представляя его в виде дробно-рациональной функции относительно параметров  $\{\alpha_i\}$ , в то время как он должен быть квадратичным по ним. Подобная ситуация делает применение метода Рунге невозможным. Как правило, действие Maple-функции `expand` на второе слагаемое под знаком интеграла в функционале, то есть  $q(x)u^2$ , помогает устранить проблему. В частности, в рассматриваемом примере в функционале  $F$  вместо  $2*\text{phi\_n}(x)^2$  следует использовать `evalf(2*phi_n(x)^2)`.

Замечание 2. Как известно, Maple, в первую очередь, стремится проводить символьные вычисления, поэтому и функционал здесь выведен в символьном виде, что не всегда бывает целесообразным. Добиться числового формата можно, как всегда, с помощью `evalf`. Например, вместо строки `"P := F(phi_n);"` записать `"P := evalf(F(phi_n));"`.

Замечание 3. Следует помнить, что здесь коэффициенты записаны с ограниченным числом значащих цифр. В некоторых случаях это может привести к дополнительной ошибке в решении. Уменьшить такую ошибку можно заданием фиксированного числа разрядов в переменной `Digits`. Другой способ – использование переменной `rs` вместо `numRoots` в определении функции `phi`.

#### Вопрос 5

Можно ли представить точное решение данного дифференциального уравнения?

Да, конечно можно. Добавим в представленный выше код такие строки:

##### Maple Code

```
# 12. Запишем и решим ДУ
G := dsolve({diff(x^2 * diff(y(x), x), x) - 2*y(x) = - 1 - 2*1/x,
y(1) = 0, D(y)(2) = 1}, y(x));

# 13. Получим точное решение
u := unapply(subs(G, y(x)), x);
```

## Вопрос 6

А сравнить точное и приближенное решения?

Без проблем. Вновь добавим в представленный выше код такие строки:

### Maple Code

```
# 14. Сначала сравним результаты в отдельных точках
for t from 1 by 0.25 to 2 do printf('x=%g phi=%g u=%g\n', t, phi(t), u(t)); od;

# 15. Для визуального сравнения построим графики
plot([phi(x), u(x)], x = 1..2, color = [red, blue], thickness = [2, 2]);
```

Для количественной характеристики процесса сходимости используем норму ошибки решения

$$\delta = \sqrt{\int_a^b [\varphi_n(x) - u(x)]^2 dx},$$

здесь  $\varphi_n(x)$  - приближенное решение методом Ритца, а  $u(x)$  - точное решение. Если метод сходится, то  $\delta$  приближается к нулю с увеличением  $n$  - степени аппроксимационного полинома. То, насколько быстро это происходит, характеризует скорость сходимости.

Организуем вычисление нормы ошибки следующим образом:

### Maple Code

```
# 16. Проверим сходимость
evalf(int((phi(x) - u(x))^2, x = 1..2))^(1/2);
```

Кроме того, можно оценить сходимость производной  $\varphi'_n(2)$  к точному значению 1 для граничного условия.

### Maple Code

```
# 17. Оценим сходимость первой производной
D(phi)(2);

# 18. Значение функционала для приближенного решения
F(phi);

# 19. Значение функционала для точного решения
evalf(F(u))
```

Предлагаю, вам оценить сходимость решения для  $n = 2, 3, 5, 6$ . Результаты будут свидетельствовать о высокой скорости сходимости метода Ритца.

## Вопрос 7

Что не так с методом Рэлея-Ритца? Почему это разные методы?

Часто, метод Ритца может быть с успехом применен к задачам на нахождение собственных функций и собственных значений. Постараюсь объяснить на примере. Рассмотрим дифференциальное уравнение

$$-\frac{d}{dx} \left( p(x) \frac{du}{dx} \right) + q(x)u = \lambda u,$$

где  $p(x) \geq 0$  имеет непрерывную производную,  $q(x)$  - непрерывна при условиях

$$u(a) = 0, \quad u(b) = 0.$$

Внимательный читатель заметил, что совокупность данного уравнения и граничных условий называют краевой задачей Штурма-Лиувилля. Для любого  $\lambda$  она всегда имеет нулевое решение.

**i**

**Информация:** Нулевое решение  $u \equiv 0$  называют тривиальным.

Те значения параметра  $\lambda$ , при которых краевая задача имеет нетривиальные решения  $u(x) \neq 0$ , называются собственными значениями (числами), а сами решения - собственными функциями данной задачи Штурма-Лиувилля.

**i**

**Информация:** Собственные функции и собственные значения обладают рядом важных свойств, среди которых необходимо отметить ортогональность любых двух собственных функций  $u_i(x)$  и  $u_j(x)$ , отвечающих двум различным собственным числам  $\lambda_i$  и  $\lambda_j$ :

$$\int_a^b u_i(x)u_j(x)dx = 0, \quad i \neq j.$$

Можно показать, что краевая задача Штурма-Лиувилля эквивалентна следующей вариационной задаче на условный экстремум (задаче поиска минимума функционала)

$$\Phi[u] = \int_a^b (p(x)u'^2 + q(x)u^2) dx,$$

при граничных условиях и изопараметрическом условии

$$u(a) = 0, \quad u(b) = 0; \quad \int_a^b u^2(x)dx = 1.$$

Последнее условие обеспечивает отличие от тождественного нуля решения  $u(x)$ , а также его нормировку. Поскольку решение изопериметрической задачи сводится к безусловной минимизации функционала

$$\Phi[u] = \int_a^b \mathcal{L}(x)dx,$$

где  $\mathcal{L}(x) = p(x)u'^2 + q(x)u^2 - \lambda u^2$  - функция Лагранжа, то процедура метода Ритца переносится сюда почти естественным образом. Следует учесть, что минимизируя функционал по параметрам аппроксимации  $\{\alpha_i\}$  с учетом изопараметрического условия мы получим нелинейную систему алгебраических уравнений относительно  $\{\alpha_1, \dots, \alpha_k, \lambda\}$ . Поэтому точное решение данной нелинейной системы алгебраических уравнений может быть затруднительным. Но если отказаться от включения в систему изопараметрического условия, приходим к обычной матричной задаче на собственные числа из линейной алгебры, методы решения которой хорошо разработаны. Вычислив собственные числа  $\lambda_n$  и соответствующие им собственные векторы  $\{\alpha_1^{(n)}, \dots, \alpha_k^{(n)}\}$ , найдем собственные функции

$$\varphi_n(x) = \sum_i \alpha_i^{(n)} N_i.$$

Затем приближенная функция  $\varphi_n(x)$  нормируется с помощью изопараметрического условия.

**i**

**Информация:** Метод Ритца дает приближение для собственного значения с избытком. Отметим также, что задача Штурма-Лиувилля в более общей формулировке, равно как подобные задачи на собственные значения и собственные функции в двумерном или трёхмерном пространстве, также без особых усилий могут быть приближённо решены методом Ритца.

### Вопрос 8

Как же тогда проверить сходимость аппроксимаций в случаях, когда точное решение задачи отсутствует или его получение затруднено?

С практической точки зрения это очень важный вопрос, поскольку прямые методы вариационного исчисления находят применение, прежде всего, для задач, не имеющих аналитического решения, а таких задач большинство.

Для оценки точности результатов, полученных методом Рунге или другими прямыми методами, обычно пользуются следующим теоретически, конечно, несовершенным, но практически достаточно надежным приемом.

Во-первых, вычислив  $\varphi_n(x)$  и  $\varphi_{n+1}(x)$  сравнивают их между собой в нескольких точках  $x \in [a, b]$ , либо по норме  $\|\varphi_{n+1}(x) - \varphi_n(x)\|$ . Если в пределах требуемой точности  $\varepsilon$  их значения совпадают, то считают, что с требуемой точностью решение рассматриваемой вариационной задачи равно  $\varphi_n(x)$ .

Во-вторых, если значения  $\varphi_n(x)$  и  $\varphi_{n+1}(x)$  в пределах заданной точности  $\varepsilon$  не совпадают, то вычисляют  $\varphi_{n+2}(x)$  и также сравнивают между собой  $\varphi_{n+1}(x)$  и  $\varphi_{n+2}(x)$ . Этот процесс продолжается до тех пор, пока значения  $\varphi_{n+k}(x)$  и  $\varphi_{n+k+1}(x)$  двух соседних приближений не совпадут в пределах заданной точности.



hello.py

```
#!/usr/bin/python

import sys
sys.stdout.write("Hello World!\n")
```

Maple Code

```
$ chmod +x hello.py
$ ./hello.py
Hello World!
```



**Notice:** In congue risus leo, in gravida enim viverra id. Donec eros mauris, bibendum vel dui at, tempor commodo augue. In vel lobortis lacus. Nam ornare ullamcorper mauris vel molestie. Maecenas vehicula ornare turpis, vitae fringilla orci consectetur vel. Nam pulvinar justo nec neque egestas tristique. Donec ac dolor at libero congue varius sed vitae lectus. Donec et tristique nulla, sit amet scelerisque orci. Maecenas a vestibulum lectus, vitae gravida nulla. Proin eget volutpat orci. Morbi eu aliquet turpis. Vivamus molestie urna quis tempor tristique. Proin hendrerit sem nec tempor sollicitudin.

#### Вопрос 9

Quisque ullamcorper placerat ipsum. Cras nibh. Morbi vel justo vitae lacus tincidunt ultrices. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit.

- (a) Do this.
- (b) Do that.
- (c) Do something else.

---

#### Algorithm 1: FastTwoSum

---

**Input:**  $(a, b)$ , two floating-point numbers

**Result:**  $(c, d)$ , such that  $a + b = c + d$

```
if  $|b| > |a|$  then
    exchange  $a$  and  $b$  ;
end
 $c \leftarrow a + b$  ;
 $z \leftarrow c - a$  ;
 $d \leftarrow b - z$  ;
return  $(c, d)$  ;
```

---

#### Вопрос 10 (with optional title)

In congue risus leo, in gravida enim viverra id. Donec eros mauris, bibendum vel dui at, tempor commodo augue. In vel lobortis lacus. Nam ornare ullamcorper mauris vel molestie. Maecenas vehicula ornare turpis, vitae fringilla orci consectetur vel. Nam pulvinar justo nec neque egestas tristique. Donec ac dolor at libero congue varius sed vitae lectus. Donec et tristique nulla, sit amet scelerisque orci. Maecenas a vestibulum lectus, vitae gravida nulla. Proin eget volutpat orci. Morbi eu aliquet turpis. Vivamus molestie urna quis tempor tristique. Proin hendrerit sem nec tempor sollicitudin.