УДК 517.518.82:5 17.518.36: 517.518.45 DOI 10.5281/zenodo.1485765

Янчук П. С., к.ф.-м.н., професор (Міжнародний економіко-гуманітарний університет імені академіка Степана Дем'янчука, м. Рівне)

ПРО ПОРІВНЯННЯ СПЕКТРАЛЬНИХ ТА АПРОКСИМАЦІЙНИХ МЕТОДІВ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ

Анотація. *У статті зроблено короткий огляд методів Рітца та Гальоркіна, одних з найважливіших інструментів сучасних обчислень. Визначено, що їх походження лежить у підході Гільберта до варіаційного числення Ейлера та в роботах Рітца, Гальоркіна, Бубнова та Кравчука. Розкрито, яким чином вони змінили варіаційне числення і стали одними із батьків сучасної обчислювальної математики. Показано шлях, який веде до сучасних обчислювальних методів. Прийнявши до уваги, що у першій половині минулого століття К. Ланцош запропонував так званий тау-метод, а в другій половині – В. Дзядик апроксимаційні методи, які тісно пов'язані з методами Гальоркіна, показано як ідеї В. Дзядика змінили сучасний стиль розв'язування диференційних та інтегральних рівнянь.*
***Ключові слова**: метод Рітца, метод Гальоркіна, тау метод Ланцоша, апроксимація алгебраїчними поліномами.*

Аннотация. *В статье сделан краткий обзор методов Ритца и Галеркина, одних из важнейших инструментов современных вычислений. Определено, что их происхождение лежит в подходе Гильберта к вариационному исчислению Эйлера и в работах Ритца, Галеркина, Бубнова и Кравчука. Раскрыто, как они изменили вариационное исчисление и стали одними из отцов современной вычислительной математики. Показан путь, который ведет к современным вычислительным методам. Приняв во внимание, что в первой половине прошлого века К. Ланцош предложил так называемый тау-метод, а во второй половине – В. Дзядык аппроксимационные методы, которые тесно увязаны с методами Галеркина, показано как идеи В. Дзядыка изменили современный стиль решения дифференциальных и интегральных уравнений.*
***Ключевые слова**: метод Ритца, метод Галеркина, тау метод Ланцоша, аппроксимация алгебраическими полиномами.*

***Annotation**. We made a brief overview of the methods of Ritz and Galerkin, or briefly Galerkin, one of the most important tools of modern computing. Their origin lies in the Hilbert approach to the Euler variational method and in the works of Ritz, Galerkin, Bubnov, and Kravchuk. We discovered how they changed the variational calculation and became one of the parents of modern*

computational mathematics. It is shown the path that leads to modern computing methods and view a long struggle for many centuries by many great mathematicians. In the first half of the last century, K. Lancos offered a so-called tau-method, and in the second half – V. Dzyadyk approximation methods, which are closely related to the methods of Galerkin. In this paper we will show how the ideas of V. Dzyadyk changed the modern style of solving differential and integral equations. The purpose of the work is to investigate how important and how different the approximation method (A-method) is from the spectral methods of Ritz and Galerkin – the main variational methods of computing. According to V. Dzyadyk, the main idea in the process of developing the a-method is to construct such an approximate solution, which maximally accurately satisfies the approximation theorem on the characteristic of the best approximation by polynomials. That is why this method is called approximation'. In this method, V. Dzyadyk obtained, not only a posteriori error estimates, but also preliminary estimates (by comparing them with the values of the best approximations of the desired solution using polynomial powers). These studies naturally arose in the application of the theorem obtained in 1970 on the application of sequences of linear operators to solving Cauchy problems for linear differential equations with polynomial coefficients.
***Keywords**: the Ritz method, the Galerkin method, the tau method of Lanczos, the approximation by algebraic polynomials.*

Одними з найбільш поширених методів комп'ютерного моделювання шляхом розв'язування задач математичної фізики, і зокрема крайових, на яких ми найбільше концентруємося є методи Рітца і Гальоркіна [1–4]. Ці методи стали ідейною основою спектральних методів та методу скінчених елементів.

Історично варіаційне числення почалося у 1696 році з відомого завдання Бернуллі іншим математикам, що стосувалося проблеми брахистохрони (кривої найшвидшого спуску), що призвело до нескінченних суперечок між братами Бернуллі. Ейлер дав у 1744 р. загальне рішення варіаційних задач у вигляді диференціального рівняння. Одинадцять років по тому Лагранж дав в знаменитому листі Ейлеру елегантне обґрунтування цього рівняння. Бездоганний внесок Ейлера щодо аналітичних та чисельних рішень різноманітних рівнянь в шістдесятих роках 18 століття, доповнив ці результати.

Метою нашої статті є дослідження вагомості і відмінності апроксимаційного методу (а-методу) від спектральних методів Рітца та Гальоркіна – основних варіаційних методів комп'ютерних обчислень.

На думку В. Дзядика, головна ідея в процесі розвитку і розробки а-методу полягає в побудові такого наближеного рішення, яке б якомога точніше задовольняло апроксимаційній теоремі про характеризацію многочлена найкращого наближення [5]. Саме тому цей метод названий апроксимаційним. У цьому методі, продовжує В. Дзядик, отримані не тільки апостеріорні оцінки похибки, але також і апріорні оцінки (шляхом їх порівняння $\forall n \in \mathbb{N}$ з величинами найкращих наближень шуканого рішення за допомогою поліномів степені не вище n). Ці дослідження природно виникли при застосуванні отриманої В. Дзядиком в 1970 році теореми при застосування послідовностей лінійних операторів вирішення задачі Коші для лінійних диференціальних рівнянь з поліноміальними коефіцієнтами.

У той час, як в спектральних методах базисні функції $\varphi_i = \varphi_i(x), x \in \mathbf{\Omega}$ визначаються відразу в усій даній області $\mathbf{\Omega} \subset \mathbb{R}^n$, де розв'язується диференційне чи інтегральне рівняння (загальніше: операторне рівняння) $Lu = f$, то в методі скінчених елементів ці функції визначаються локально.

У спектральних методах [1–4; 6] базисні функції вибираються у вигляді тригонометричних чи алгебрачних поліномів. Щоб забезпечити стійкість та хорошу апроксимацію, у ролі глобально заданих алгебраїчних поліномів беруть поліноми Чебишова, або поліноми Лежандра. Також використовуються і інші поліноми із сімейства класичних ортогональних поліномів: поліноми Гегенбауера, до якого належать поліноми Чебишова та Лежандра, і загальніше – поліноми Якобі.

Відомий спеціаліст в галузі спектральних методів J. P. Boyd [6], сформулював один з моральних принципів для обчислювачів:

– коли Ви сумніваєтесь використовуйте поліноми Чебишова, хіба що функція є періодичною і тоді звичайні ряди Фур'є є кращими;

– якщо ви не впевнені, що інший набір базисних функцій краще, використовуйте поліноми Чебишева;

– якщо ви дійсно не впевнені, що краще використовувати інший набір базисних функцій, скористайтеся поліномами Чебишева.

Нехай елементи $\varphi_i, i = 1,2,...$ утворюють базис гільбертового простору H. Якщо для всіх $i = 1,2,...$ $(u, \varphi_i) = 0,$ то $u = 0.$ Якщо $Lu = f$ – рівняння в H і існує такий елемент u_0, що:

$$(Lu - f, \varphi_i), i = 1,2,..., \tag{1}$$

то $Lu_0 - f = 0$ і u_0 є розв'язком рівняння $Lu = f$. І тоді логічною є вимога методу Гальоркіна:

$$(Lu - f, \varphi_i), i = 1,2,..., N, \tag{2}$$

прийнявши до уваги (1).

Апроксимаційний метод для задачі Коші. У роботах В. Дзядика, його учнів та послідовників досліджується питання про наближення поліномами задачі Коші на сегменті $[-h,h], h>0,$ розв'язку задачі Коші для звичайних диференційних рівнянь з многочленними коефіцієнтами вигляду:

$$\sum_{j=0}^{k} a_j(x)\frac{d^{k-j}y}{dx^{k-j}} = p(x), \frac{d^j y(0)}{dx^j} = y_j, j=0,...,k-1, \tag{3}$$

де $a_j(x)$ і $p(x)$ – поліноми і при цьому $a_0(x) \ge c > 0 \quad \forall x \in [-h,h]$.

У цьому пункті ми будемо придержуватися схеми викладу апроксимаційного методу В. Дзядика, так як його подавав сам автор [7].

Щоб надати роз'яснення ідеї, яка лежить в основі запропонованого нижче методу, розглянемо спочатку найпростішу задачу Коші для лінійних диференціальних рівнянь з поліноміальними коефіцієнтами вигляду:

$$\frac{dy}{dx} = y, y(0) = 1 \Rightarrow y(x) = e^x, x \in [-h,h]. \tag{4}$$

Згідно з принципом, що випливає з теореми про застосування послідовностей лінійних операторів, для того щоб знайти наближений поліноміальний розв'язок $y_n = y_n(x)$ степені $\le n$ задачі Коші на сегменті $[-h,h]$, доцільно:

замінити цю задачу еквівалентним їй інтегральним рівнянням:

$$y(x) = 1 + \int_{-1}^{x} y(t)\,dt; \tag{5}$$

замінити отримане інтегральне рівняння операторним рівнянням вигляду:

$$y_n(x) = U_n\left(1 + \int_{-1}^{x} y_n(t)\,dt\right), \tag{6}$$

де лінійний оператор U_n є пересадкою на $[-h,h]$ деякого стандартного оператора $\tilde{U}_n$ із $[-1,1]$, а $\tilde{U}_n f$ поліном степені $\le n$ для довільної функції f з області визначення оператора $\tilde{U}_n$.

На підставі теореми Лебега бачимо, що в ролі операторів U_n доцільно взяти, по-перше, послідовність яких-небудь проекційних операторів, у яких норми є можливо меншими, бо в цьому випадку кожен лінійний оператор наближатиме невідоме нам рішення $y(x)$ з точністю до невеликого множника $(\|U_n\|+1)$ найкращим чином. По-друге, серед таких лінійних проекційних операторів U_n бажано вибрати оператори, при яких операторне рівняння (6) було б легко ефективно розв'язаним. Такі оператори існують і ними є, наприклад, оператори Фур'є-Лежандра, Фур'є-Чебишова, Фур'є-Якобі.

Нехай U_n оператор взяття часткової суми перших $n+1$ членів ряду Фур'є-Лежандра довільної функції $f = f(x)$ на $[-h,h]$ (для якої таке розвинення існує). Розвинемо функцію:

$$\varphi(x)=1+\int_{-1}^{x} y_n(t)\,dt \tag{7}$$

в ряд Фур'є-Чебишова, який обірветься на $n+1$ члені:

$$1+\int_{-1}^{x} y_n(t)\,dt=\sum_{i=0}^{n+1}\tau_i T_i\left(\frac{x}{h}\right),\tau_i=\frac{2}{\pi h}\int_{-h}^{h}\frac{\varphi(x)T_i(x/h)}{\sqrt{1-x^2}}, \tag{8}$$

звідки випливає:

$$U_n\left(1+\int_{-1}^{x} y_n(t)\,dt\right)=1+\int_{-1}^{x} y_n(t)\,dt-\tau_{n+1}T_{n+1}\left(\frac{x}{h}\right). \tag{9}$$

Підставляючи (9) в праву частину (6), подамо операторне рівняння у вигляді:

$$y_n(x)=1+\int_{-1}^{x} y_n(t)\,dt-\tau_{n+1}T_{n+1}\left(\frac{x}{h}\right). \tag{10}$$

Закономірності, виявлені для задачі Коші:

$$\frac{dy}{dx}=y,y(0)=1\Leftrightarrow y(x)=1+\int_{-1}^{x} y(t)\,dt \tag{11}$$

носять загальний характер і у випадку задачі (3) необхідно виконати таке:

Шляхом послідовного інтегрування частинами на проміжку $[0,x]$ рівняння (3) замінити вихідну задачу Коші еквівалентним рівнянням Вольтерра вигляду:

$$a_0(x)y(x)=\int_0^x P_l(x,t)y(t)dt+\tilde{p}(x), \quad (12)$$

де $l-$параметр задачі, який визначається формулою:

$$l=\max_{0\le j\le k}\left\{deg\ a_j(x)+j-1\right\}, \quad (13)$$

$P_l(x,t)-$ поліном по змінних x і t, причому сума показників при x і t не перевищує l; $\tilde{p}(x)-$ сума k -го інтеграла від p по проміжку $[0,x]$:

$$\frac{1}{(k-1)!}\int_{-1}^x (x-t)^{k-1} p(t)dt \quad (14)$$

з деяким многочленом степені не вище $k-1$.

Відправляючись від інтегрального рівняння (12), необхідно побудувати інтегральне рівняння вигляду

$$a_0(x)y(x)=\int_0^x P_l(x,t)y(t)dt+\tilde{p}(x)-\varepsilon_n(x), \quad (15)$$

де

$$\varepsilon_n(x)=\sum_{i=1}^{l+1}\tau_{n+i}T_{n+i}\left(\frac{x}{h}\right), y_n(x)=\sum_{i=0}^{n}c_i x^i, \quad (16)$$

c_j і τ_{n+i} —невідомі величини.

За схемою методу Дзядика операторне рівняння (15) належить розв'язувати подавши наближений розв'язок $y_n(x)$ у вигляді скінченого відрізка ряду Тейлора:

$$y_n(x)=\sum_{j=0}^{n}c_j x^j, \quad (17)$$

або у вигляді скінченного ряду Фур'є-Чебишова:

$$y_n(x)=\sum_{j=0}^{n}a_jT_j\left(\frac{x}{h}\right). \qquad (18)$$

Для інтегрування поліномів, зображених у вигляді (17) не виникає трупнощів, а для інтегрування рядів Фур'є-Чебишова для $h>0$ та $n\geq 2$ можна використати тотожність:

$$\int_0^x T_k\left(\frac{t}{h}\right)dt=\frac{h}{2}\left(\frac{T_{k+1}(t/h)}{k+1}-\frac{T_{k-1}(t/h)}{k-1}\right)+\varepsilon_k(-1)^{\frac{k-1}{2}}\frac{2k}{k^2-1}, \qquad (19)$$

де $\varepsilon_k=0$, якщо $k-$ парне, і $\varepsilon_k=1$, якщо $k-$ непарне.

Для реалізації а-методу Дзядика шляхом символьних обчислень з допомогою системи комп'ютерної математики Maple, або іншої подібної, доцільно наближений поліноміальний розв'язок подати у вигляді (17), а для наближених обчислень, які використовують подання чисел з плаваючою точкою, наприклад, C, C++,C#, Java, Delphi та інші, для уникнення нагромадження похибок обчислень більше підійде подання (18).

Вже пройшло понад 30 років з моменту виходу монографії Дзядика, присвяченій апроксимаційним методам розв'язування диференційних та інтегральних рівнянь [5], тому тепер є значно більше можливостей, щоб реалізувати а-метод та інші методи за допомогою операцій символьної математики:

– додавання та множення поліномів;
– диференціювання поліномів;
– інтегрування поліномів;
– розвинення поліномів у ряди Фур'є-Чебишева, Фур'є-Лежандра та ін.

При цьому, звичайно, немає необхідності використовувати напряму наведені там формули з метою явного подання ядра $P_l(x,t)$ та правої частини $\tilde{p}(x)$ інтегрального рівняння (12) чи операторного рівняння (15). Проте, наведені в згаданій монографії формули є чудовим дороговказом для створення та налагодження відповідних програмних продуктів.

Часткові суми ряду Фур'є-Чебишова наближають достатньо гладкі функції, визначені на проміжку $[-h,h]$ не тільки в метриці простору $L_{2,q}$:

$$\left(\|u\|_{L_{2,q}}\right)^2 = \int_{-h}^{h} q(x)u^2(x)dx, q(x) = \frac{1}{\sqrt{1-(x/h)^2}}, \tag{20}$$

а також і в рівномірній метриці:

$$\|u\|_{C[-h,h]} = \max_{-h\le x\le h}|u(x)|. \tag{21}$$

Як добре відомо, величина найкращого наближення поліномами u_n степені $deg\, u_n \le n$ в метриці простору $L_{2,q}$ кожної індивідуальної функції $u \in L_{2,q}$ реалізується на часткових сумах $S_n u$ ряду Фур'є-Чебишова:

$$E_n(u)_{L_{2,q}} = \min_{u_n}\|u-u_n\| = \|u-S_n u\|_{L_{2,q}}. \tag{22}$$

Звісно, апроксимаційними методами ми не знаходимо $S_n y$, розв'язку задачі Коші, проте знаходимо майже найкраще наближення до нього (в термінології В. Дзядика), точніше справедлива наступна

Теорема Дзядика (*про асимптотичні властивості а-методу*). Нехай $y = y(x)$ розв'язок задачі Коші (6), $a_k(x) = 1, x \in [-h,h]$.

Тоді операторне рівняння (15) при довільному фіксованому k і не дуже малих n має єдиний розв'язок $y_n = y_n(x)$; а різниця $y(x) - y_n(x)$ задовольняє асимптотичній рівності:

$$\|y-y_n\|_{L_{2,q}} = \left(1+O\left(\frac{1}{n}\right)\right)E_n(y)_{L_{2,q}}, q = \left(1-\left(\frac{x}{h}\right)\right)^{-\frac{1}{2}}. \tag{23}$$

З наведеного дослідження можна зробити висновок, що метод В. Дзядика дає асимптотично найкраще наближення при $n \to \infty$,тобто практично таке наближення, яке дає ряд Фур'є-Чебишова у випадку відомих функцій. Методи Гальоркіна та тау-метод Ланцоша, взагалі кажучи не дають асимптотично найкраще наближення. У роботах [7–10] результати про апроксимаційний метод поширені на випадок крайових задач математичної фізики і встановлено, що многочленні наближення є асимптотично найкращими.

1. Ректорис К. Вариационные методы в математической физике и технике / К. Ректорис. – М., 1985. – 590 с. **2.** Флетчер К. Численные методы на основе метода Галеркина / К. Флетчер. – М.,1988. – 352 с. **3.** Бабенко К. И. Основы численного анализа / К. И. Бабенко.–М. : Наука, 1986. – 744 с. **4.** Савула Я. Г. Числовий аналіз задач математичної фізики : підручник / Я. Г. Савула. – Львів : видавничий центр ЛНУ імені Франка, 2004. – 221 с. **5.** Дзядык В. К. Введение в теорию равномерного приближения функций полиномами: монография / В. К. Дзядык. – Москва : Наука, 1977.– 512 с. **6**. John P. Boyd. Chebyshev and Fourier Spectral Methods: / P. Boyd John. – New York : Dover Publications, 2001. – 688 p. **7.** Дзядык В. К. Аппроксимационные методы решения дифференциальных и интегральных уравнений. монография / В. К. Дзядык– Киев: Наукова думка, 1988. – 304 с. **8**. Янчук П. С. Использование А–метода при решении эллиптических и параболических уравнений / П. С. Янчук // Гармонический анализ и развитие аппроксимационных методов. – Киев, 1989. – С. 112–121. **9**. Янчук П. С. Про оцінки похибок поліноміальної апроксимації розв’язку задачі Неймана для рівняння Пуассона / П. С. Янчук // Волинський математичний вісник. – 2012. – Вип. 9(18). – С. 189–207. **10**. Янчук П. С. Про спектральний метод наближеного розв’язування рівняння Пуассона / П. С. Янчук // Питання прикладної математики і математичного моделювання. – Д., 2012. – С. 261–268. **11**. Янчук П. С. Поліноміальна апроксимація розв’язку задачі Діріхле для рівняння Пуассона з неоднорідними крайовими умовами / П. С. Янчук // Волинський математичний вісник. – 2011. – Вип. 8(17). – С. 213–239.

Рецензент: д.ф.-м. наук, професор Джунь Й. В