Исследование вариационных задач для квадратичных функционалов: доказательный вычислительный эксперимент

Шишкин Владимир Андреевич

Пермский государственный университет

Новосибирск, 30 мая – 4 июня 2011 г.

Постановка задачи

Вариационная задача

$$\mathcal{I}(x) = \sum_{i=1}^{N} \langle T_{1i}x, T_{2i}x \rangle_{\mathbf{L}_2} + \langle F_0, x \rangle_{\mathbf{X}} \to \min,$$
$$\langle \pi_i, x \rangle_{\mathbf{X}} - \alpha_i = 0, \quad i = 1, \ldots, n_1,$$
$$\langle \kappa_i, x \rangle_{\mathbf{X}} - \beta_i \leqslant 0, \quad i = 1, \ldots, n_2.$$

$T_{ji} \colon \mathbf{X} \to \mathbf{L}_2$; $F_0, \pi_i, \kappa_j \in \mathbf{X}^*$, $\alpha_i, \beta_j \in \mathbb{R}$, $i = 1, \ldots, n_1$, $j = 1, \ldots, n_2$.
$\mathbf{X} \simeq \mathbf{L}_2 \times \mathbb{R}^m$, $m \leqslant n_1$.

Постановка задачи

Вариационная задача

$$\mathcal{I}(x) = \sum_{i=1}^{N} \langle T_{1i}x, T_{2i}x \rangle_{\mathbf{L}_2} + \langle F_0, x \rangle_{\mathbf{X}} \to \min,$$

$$\langle \pi_i, x \rangle_{\mathbf{X}} - \alpha_i = 0, \quad i = 1, \ldots, n_1,$$

$$\langle \kappa_i, x \rangle_{\mathbf{X}} - \beta_i \leqslant 0, \quad i = 1, \ldots, n_2.$$

$T_{ji} \colon \mathbf{X} \to \mathbf{L}_2$; $F_0, \pi_i, \kappa_j \in \mathbf{X}^*$, $\alpha_i, \beta_j \in \mathbb{R}$, $i = 1, \ldots, n_1$, $j = 1, \ldots, n_2$.
$\mathbf{X} \simeq \mathbf{L}_2 \times \mathbb{R}^m$, $m \leqslant n_1$.

$$\delta x = z, \qquad \langle \pi_i, x \rangle_{\mathbf{X}} = \alpha_i, \quad i = 1, \ldots, m$$

$\delta \colon \mathbf{X} \to \mathbf{L}_2$, $\dim \ker \delta = m$; $\ker[\delta, \pi] = \{0\} \;\Rightarrow \exists [\delta, \pi]^{-1} = \{\Lambda, Y\}$

Постановка задачи

Вариационная задача

$$
\mathcal{I}(x) = \sum_{i=1}^{N} \langle T_{1i}x, T_{2i}x \rangle_{\mathbf{L}_2} + \langle F_0, x \rangle_{\mathbf{X}} \to \min,
$$

$$
\langle \pi_i, x \rangle_{\mathbf{X}} - \alpha_i = 0, \quad i = 1, \ldots, n_1,
$$

$$
\langle \kappa_i, x \rangle_{\mathbf{X}} - \beta_i \leqslant 0, \quad i = 1, \ldots, n_2.
$$

$T_{ji} \colon \mathbf{X} \to \mathbf{L}_2$; $F_0, \pi_i, \kappa_j \in \mathbf{X}^*$, $\alpha_i, \beta_j \in \mathbb{R}$, $i = 1, \ldots, n_1$, $j = 1, \ldots, n_2$.
$\mathbf{X} \simeq \mathbf{L}_2 \times \mathbb{R}^m$, $m \leqslant n_1$.

$$
\delta x = z, \qquad \langle \pi_i, x \rangle_{\mathbf{X}} = \alpha_i, \quad i = 1, \ldots, m
$$

$\delta \colon \mathbf{X} \to \mathbf{L}_2$, $\dim \ker \delta = m$; $\ker[\delta, \pi] = \{0\} \ \Rightarrow \exists [\delta, \pi]^{-1} = \{\Lambda, Y\}$

$$
x = \Lambda z + Y\alpha', \quad \alpha' = \mathrm{col}\{\alpha_1, \ldots, \alpha_m\}
$$

Постановка задачи

Вариационная задача в $\mathbf{L}_2$

$$\mathcal{I}_1(z) = \frac{1}{2}\langle Qz, z\rangle_{\mathbf{L}_2} + \langle f_0, z\rangle_{\mathbf{L}_2} + \psi_0 \to \min$$

$$g_i(z) = \langle \gamma_i, z\rangle_{\mathbf{L}_2} - a_i = 0, \quad i = 1, \ldots, n_1 - m,$$

$$h_i(z) = \langle \eta_i, z\rangle_{\mathbf{L}_2} - b_i \leqslant 0, \quad i = 1, \ldots, n_2.$$

Постановка задачи

Вариационная задача в $\mathbf{L}_2$

$$\mathcal{I}_1(z) = \frac{1}{2}\langle Qz, z\rangle_{\mathbf{L}_2} + \langle f_0, z\rangle_{\mathbf{L}_2} + \psi_0 \to \min$$

$$g_i(z) = \langle \gamma_i, z\rangle_{\mathbf{L}_2} - a_i = 0, \quad i = 1, \ldots, n_1 - m,$$

$$h_i(z) = \langle \eta_i, z\rangle_{\mathbf{L}_2} - b_i \leqslant 0, \quad i = 1, \ldots, n_2.$$

$$\mathcal{L}(z, \lambda_1, \lambda_2) = \mathcal{I}_1(z) + \sum_{i=1}^{n_1-m} \lambda_{1i} g_i(z) + \sum_{i=1}^{n_2} \lambda_{2i} h_i(z) = \\ = \frac{1}{2}\langle Qz, z\rangle_{\mathbf{L}_2} - \big\langle f(\lambda), z\big\rangle_{\mathbf{L}_2} + \psi(\lambda)$$

Условия существования решения

Необходимые

Если $\hat{z}$ — решение задачи, то существуют такие не равные одновременно нулю $\hat{\lambda}_1$ и $\hat{\lambda}_2$, что

1. $\langle Q\hat{z} - f(\hat{\lambda}), \xi \rangle_{\mathbf{L}_2} = 0$ для любого $\xi \in \mathbf{L}_2$;
2. $\hat{\lambda}_2 \geqslant 0$;
3. $\hat{\lambda}_{2i} h_i(\hat{z}) = 0$.

Достаточные

Если выполняются необходимые условия и Q — положительно определённый оператор, то $\hat{z}$ — решение задачи.

Условия существования решения

Необходимые

Если $\hat{z}$ — решение задачи, то существуют такие не равные одновременно нулю $\hat{\lambda}_1$ и $\hat{\lambda}_2$, что

1. $\langle Q\hat{z} - f(\hat{\lambda}), \xi\rangle_{\mathbf{L}_2} = 0$ для любого $\xi \in \mathbf{L}_2$;
2. $\hat{\lambda}_2 \geqslant 0$;
3. $\hat{\lambda}_{2i} h_i(\hat{z}) = 0$.

Достаточные

Если выполняются необходимые условия и Q — положительно определённый оператор, то $\hat{z}$ — решение задачи.

В дальнейшем предполагаем, что $Q = I - K$, где I — тождественный оператор, K — самосопряжённый оператор Гильберта–Шмидта.

Доказательный вычислительный эксперимент

1. Построить модельное уравнение
$$z - \tilde{K}z = \tilde{f}(z), \tag{1}$$
с $\tilde{K}$ и $\tilde{f}$ близкими по норме к K и f соответственно.
2. Решить (1).
3. Проверить обратимость оператора $I - K$.
4. Проверить положительную определённость оператора $I - K$.

Машинно–вычислимые функции

Машинно–представимые числа

$\mathbb{F}$ — подмножество множества вещественных чисел $\mathbb{R}$.

Стандарты IEEE 754-1985 и IEEE 854-1987. `GNU MP`.

$\tilde{\mathbb{Q}}$ — подмножество множества рациональных чисел $\mathbb{Q}$.

`Maple`, `Maxima`, `Mathematica` и т.д. `GNU MP`.

Машинно–вычислимые функции

Для гарантированной оценки точности результата используется

- *рациональная арифметика* ($x \in \tilde{\mathbb{Q}}$).
- *интеральная арифметика* ($x = [\underline{x}, \overline{x}] \in \mathbb{IR}$)

  $\mathbb{IF}$: $\underline{x}, \overline{x} \in \mathbb{F}$, при выполнении арифметических операций используется направленное округление, реализованное программно или аппаратно.
  Библиотеки `INTLIB`, `boost` и др.
  Процессоры `Intel`, `AMD`; графические ускорители `nVidia` на платформе Fermi.

  $\mathbb{IQ}$: $\underline{x}, \overline{x} \in \tilde{\mathbb{Q}}$.

Машинно–вычислимые функции

Машинно–вычислимая функция

Функция, отображающая $\mathbb{IR}$ в $\mathbb{IR}$ или $\tilde{\mathbb{Q}}$ в $\tilde{\mathbb{Q}}$.
Иногда требуется, чтобы производные и интегралы от вычислимой функции также были вычислимыми функциями.

Пример: многочлены с коэффициентами из $\mathbb{IR}$ или $\tilde{\mathbb{Q}}$.

Аппроксимация

$\mathbf{L}_2[a,b]$, $a, b \in \mathbb{R}$

$$z(t) - \int_a^b K(t,s)z(s)\,ds = f(t,\lambda), \quad t \in [a,b]$$

Аппроксимация

$\mathbf{L}_2[\overline{a}, \underline{b}]$, $\overline{a}, \underline{b} \in \tilde{\mathbb{Q}}$

$$z(t) - \int_{\overline{a}}^{\underline{b}} \tilde{K}(t,s) z(s)\, ds = \tilde{f}(t,\lambda), \quad t \in [\overline{a}, \underline{b}]$$

$\tilde{K}(t,s)$ — вырожденное ядро.

Аппроксимация

$\mathbf{L}_2[\overline{a}, \underline{b}]$, $\overline{a}, \underline{b} \in \tilde{\mathbb{Q}}$

$$z(t) - \int_{\overline{a}}^{\underline{b}} \tilde{K}(t,s) z(s)\, ds = \tilde{f}(t,\lambda), \quad t \in [\overline{a}, \underline{b}]$$

$\tilde{K}(t,s)$ — вырожденное ядро.

1. Разложение в ряд Фурье.
2. Разложение на подобластях в ряд Фурье.
3. Композиция элементарных функций, представленных разложениями в ряд Фурье.

Аппроксимация

$\mathbf{L}_2[\overline{a}, \underline{b}]$, $\overline{a}, \underline{b} \in \tilde{\mathbb{Q}}$

$$z(t) - \int_{\overline{a}}^{\underline{b}} \tilde{K}(t,s) z(s)\, ds = \tilde{f}(t, \lambda), \quad t \in [\overline{a}, \underline{b}]$$

$\tilde{K}(t,s)$ — вырожденное ядро.

1. Разложение в ряд Фурье.
2. Разложение на подобластях в ряд Фурье.
3. Композиция элементарных функций, представленных разложениями в ряд Фурье.

Базисные функции:

- ортогональные многочлены Лежандра;
- ортогональные функции Радемахера–Уолша.

$\{\phi_i\}_1^\infty$ — полная система компьютерно–вычислимых функций, ортогональных на $[\alpha, \beta]$, $\alpha, \beta \in \tilde{\mathbb{Q}}$, с единичным весом:

$$\langle \phi_i, \phi_j \rangle_{\mathbf{L}_2} = \delta_{ij} c_i,$$

где $c_i \in \tilde{\mathbb{Q}}$.

$\{\phi_i\}_1^\infty$ — полная система компьютерно–вычислимых функций, ортогональных на $[\alpha, \beta]$, $\alpha, \beta \in \tilde{\mathbb{Q}}$, с единичным весом:

$$\langle \phi_i, \phi_j \rangle_{\mathbf{L}_2} = \delta_{ij} c_i,$$

где $c_i \in \tilde{\mathbb{Q}}$.

$$\overline{a} = \tau_0 < \tau_1 < \dots < \tau_n = \underline{b}, \qquad \tau_i \in \tilde{\mathbb{Q}}, \quad i = 0, 1, \dots, n$$

$$\psi_i(t) = \alpha + \frac{t - \tau_{i-1}}{\tau_i - \tau_{i-1}} (\beta - \alpha)$$

Аппроксимация

Базисные функции

$\{\phi_i\}_1^\infty$ — полная система компьютерно–вычислимых функций, ортогональных на $[\alpha, \beta]$, $\alpha, \beta \in \tilde{\mathbb{Q}}$, с единичным весом:

$$\langle \phi_i, \phi_j \rangle_{\mathbf{L}_2} = \delta_{ij} c_i,$$

где $c_i \in \tilde{\mathbb{Q}}$.

$$\overline{a} = \tau_0 < \tau_1 < \cdots < \tau_n = \underline{b}, \qquad \tau_i \in \tilde{\mathbb{Q}}, \quad i = 0, 1, \ldots, n$$
$$\psi_i(t) = \alpha + \frac{t - \tau_{i-1}}{\tau_i - \tau_{i-1}}(\beta - \alpha)$$

$\mathscr{P}_i = \{\phi_j \circ \psi_i\}_{j=1}^\infty$ — базис на $[\tau_{i-1}, \tau_i]$, $i = 1, \ldots, n$.

Аппроксимация f

$$f(t,\lambda) = f_0(t) + \sum_{l=1}^{L} f_l(t)\lambda_l, \quad L = n_1 - m + n_2$$

$$f_l(t) \in \mathfrak{f}_l(t) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m_i} \mathfrak{f}_{lij}\phi_j\big(\psi_i(t)\big)\chi_{[\tau_{i-1},\tau_i]}(t)$$

$$\mathfrak{f}_{lij} = \begin{cases} [\tilde{f}_{lij} - \Delta_i f_l, \tilde{f}_{lij} + \Delta_i f_l], & j = 1, \\ \tilde{f}_{lij}, & j > 0. \end{cases}$$

$$\tilde{f}(t,\lambda) = \operatorname{mid}\mathfrak{f}(t,\lambda)$$

Аппроксимация K

$$K(t,s) \in \mathfrak{K}(t,s) = \sum_{i_1=1}^{n}\sum_{i_2=1}^{n}\sum_{j_1=1}^{m_{i_1}}\sum_{j_2=1}^{m_{i_2}} \mathfrak{K}_{i_1 i_2 j_1 j_2} \times$$
$$\times\, \phi_{j_1}\big(\psi_{i_1}(t)\big)\phi_{j_2}\big(\psi_{i_2}(s)\big)\chi_{[\tau_{i_1-1},\tau_{i_1}]}(t)\chi_{[\tau_{i_2-1},\tau_{i_2}]}(s)$$

$$\mathfrak{K}_{i_1 i_2 j_1 j_2} = \begin{cases} [\tilde{K}_{i_1 i_2 j_1 j_2} - \Delta_{i_1 i_2} K, \tilde{K}_{i_1 i_2 j_1 j_2} + \Delta_{i_1 i_2} K], & j_1 = 1 \text{ и } j_2 = 1, \\ \tilde{K}_{i_1 i_2 j_1 j_2}, & j_1 > 1 \text{ или } j_2 > 1. \end{cases}$$

$$\tilde{K}(t,s) = \operatorname{mid} \mathfrak{K}(t,s)$$

Решение уравнения $z - \tilde{K}z = \tilde{f}(\lambda)$

$$AZ = B_0 + \sum_{l=1}^{L} \lambda_l B_l$$

Решение уравнения $z - \tilde{K}z = \tilde{f}(\lambda)$

$$AZ = B_0 + \sum_{l=1}^{L} \lambda_l B_l$$

$$A_{ij} = \delta_{ij} - K_{\xi(i)\xi(j)\zeta(i)\zeta(j)} \cdot c_{\zeta(j)} \frac{\tau_{\xi(j)} - \tau_{\xi(j)-1}}{\beta - \alpha}$$

$$B_{li} = \sum_{k=1}^{N} f_{l\xi(k)\zeta(k)} K_{\xi(i)\xi(k)\zeta(i)\zeta(k)} \cdot c_{\zeta(k)} \frac{\tau_{\xi(k)} - \tau_{\xi(k)-1}}{\beta - \alpha}$$

Решение уравнения $z - \tilde{K}z = \tilde{f}(\lambda)$

$$AZ = B_0 + \sum_{l=1}^{L} \lambda_l B_l$$

$$A_{ij} = \delta_{ij} - K_{\xi(i)\xi(j)\zeta(i)\zeta(j)} \cdot c_{\zeta(j)} \frac{\tau_{\xi(j)} - \tau_{\xi(j)-1}}{\beta - \alpha}$$

$$B_{li} = \sum_{k=1}^{N} f_{l\xi(k)\zeta(k)} K_{\xi(i)\xi(k)\zeta(i)\zeta(k)} \cdot c_{\zeta(k)} \frac{\tau_{\xi(k)} - \tau_{\xi(k)-1}}{\beta - \alpha}$$

$$Z = \underbrace{A^{-1}B_0}_{Z^{(0)}} + \sum_{l=1}^{L} \lambda_l \underbrace{A^{-1}B_l}_{Z^{(l)}}$$

Решение уравнения $z - \tilde{K}z = \tilde{f}(\lambda)$

$$AZ = B_0 + \sum_{l=1}^{L} \lambda_l B_l$$

$$A_{ij} = \delta_{ij} - K_{\xi(i)\xi(j)\zeta(i)\zeta(j)} \cdot c_{\zeta(j)} \frac{\tau_{\xi(j)} - \tau_{\xi(j)-1}}{\beta - \alpha}$$

$$B_{li} = \sum_{k=1}^{N} f_{l\xi(k)\zeta(k)} K_{\xi(i)\xi(k)\zeta(i)\zeta(k)} \cdot c_{\zeta(k)} \frac{\tau_{\xi(k)} - \tau_{\xi(k)-1}}{\beta - \alpha}$$

$$Z = \underbrace{A^{-1}B_0}_{Z^{(0)}} + \sum_{l=1}^{L} \lambda_l \underbrace{A^{-1}B_l}_{Z^{(l)}}$$

$$z(t,\lambda) = \tilde{f}(t,\lambda) + \sum_{i=1}^{N} u_i Z_i$$

Проверка обратимости оператора $I - K$

Теорема (Об обратном операторе)

Если оператор $I - \tilde{K}$ *имеет обратный и выполняется неравенство*

$$\|K - \tilde{K}\|_{\mathscr{L}(\mathbf{L}_2)} < \frac{1}{\|(I - \tilde{K})^{-1}\|_{\mathscr{L}(\mathbf{L}_2)}},$$

то оператор $I - K$ *обратим.*

Проверка обратимости оператора $I - K$

$$(I - \tilde{K})^{-1} = I + \tilde{R}$$

$$\|I + \tilde{R}\|_{\mathscr{L}(\mathbf{L}_2)} \leqslant 1 + \|\tilde{R}\|_{\mathscr{L}(\mathbf{L}_2)}$$

Проверка обратимости оператора $I - K$

$$(I-\tilde{K})^{-1} = I + \tilde{R}$$

$$\|I+\tilde{R}\|_{\mathscr{L}(\mathbf{L}_2)} \leqslant 1 + \|\tilde{R}\|_{\mathscr{L}(\mathbf{L}_2)}$$

$$\|\tilde{R}\|^2_{\mathscr{L}(\mathbf{L}_2)} = \frac{1}{(\beta-\alpha)^2}\sum_{j_1=1}^{N}\sum_{j_2=1}^{N}\sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{N} A^{-1}_{ij_1}A^{-1}_{ij_2}K_{\xi(j_1)\xi(k)\zeta(j_1)\zeta(k)}\times$$
$$\times K_{\xi(j_2)\xi(k)\zeta(j_2)\zeta(k)}c_{\zeta(i)}c_{\zeta(k)}(\tau_{\xi(i)}-\tau_{\xi(i)-1})(\tau_{\xi(k)}-\tau_{\xi(k)-1}).$$

Оценка погрешности решения

Теорема (Голуб, Ван Лоун)

Предположим, что

$$
\begin{aligned}
Ax &= b, \qquad A \in \mathbb{R}^{n\times n}, \quad 0 \neq b \in \mathbb{R}^n, \\
(A + \Delta A)y &= b + \Delta b, \qquad \Delta A \in \mathbb{R}^{n\times n}, \quad \Delta b \in \mathbb{R}^n
\end{aligned}
$$

и что $|\Delta A| \leqslant \delta|A|$, $|\Delta b| \leqslant \delta|b|$. *Если* $\delta\kappa_\infty(A) = r < 1$, *то* $A + \Delta A$ *невырожденна, и*

$$\frac{\|y - x\|_\infty}{\|x\|_\infty} \leqslant \frac{2\delta}{1 - r} \big\||A^{-1}| \cdot |A|\big\|_\infty.$$

$|X|$ — матрица, состоящая из абсолютных значений X.

Оценка погрешности решения

$$\|\Delta Z\|_\infty \leqslant \frac{2\delta}{1-r}\||A|\cdot|A^{-1}|\|_\infty \|Z\|_\infty$$

$$\delta = \max\left(\max_{i,j}\frac{|\Delta A_{ij}|}{|A_{ij}|}, \max_{i}\frac{|\Delta B_i|}{|B_i|}\right)$$

$$r = \delta\cdot\|A\|_\infty\cdot\|A^{-1}\|_\infty$$

Проверка положительной определённости оператора $I - K$

Теорема

Пусть $\tilde{K}$ *— компактный самосопряжённый оператор и* $\tilde{\mu}_{\min}, \tilde{\mu}_{\max}$ *являются нижней и верхней границами его спектра соответственно. Тогда значения верхней и нижней границ* $\mu_{\min}, \mu_{\max}$ *спектра возмущённого оператора* $K = \tilde{K} + \Delta K$*, где* ΔK *— компактный самосопряжённый оператор, удовлетворяют неравенствам*

$$\tilde{\mu}_{\min} - \|\Delta K\| \leqslant \mu_{\min} \leqslant \tilde{\mu}_{\min} + \|\Delta K\|$$

и

$$\tilde{\mu}_{\max} - \|\Delta K\| \leqslant \mu_{\max} \leqslant \tilde{\mu}_{\max} + \|\Delta K\|.$$

Проверка положительной определённости оператора $I - K$

1. Вычислить характеристический многочлен $p(\sigma)$ матрицы $E_N - A$.
2. Оценить сверху значение наибольшего корня $\sigma_{\max}$.

$$\overline{\sigma_{\max}} + \|K - \tilde{K}\|_{\mathscr{L}(\mathbf{L}_2)} < 1 \quad \Rightarrow \quad Q > 0$$

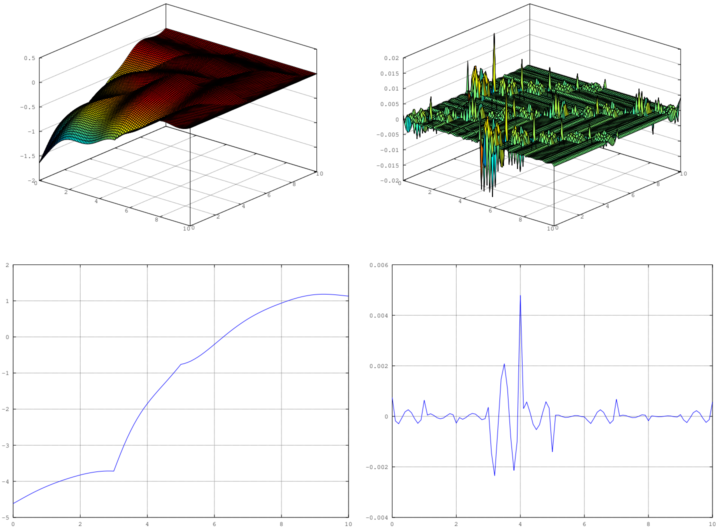
Пример

$$\int_0^{10}\Big(\dot{x}(t)^2+\sin(2t)\exp\big(-\frac{t}{2}\big)x(t)^2+$$

$$+\big(1+\cos(t)\big)x(t)+\frac{4}{t^2+1}x(t-2)x(t+3)\Big)\,dt\to\min,$$

$$x(\xi)\equiv 1,\ \xi<0,\quad x(\xi)\equiv -1,\ \xi>10,$$
$$x(0)=-1,\quad x(10)=1.$$

Пример


0.5
0
-0.5
-1
-1.5
-2
0 2 4 6 8 10
0 2 4 6 8 10
0.02
0.015
0.01
0.005
0
-0.005
-0.01
-0.015
-0.02
0 2 4 6 8 10
0 2 4 6 8 10
2
1
0
-1
-2
-3
-4
-5
0 2 4 6 8 10
0.006
0.004
0.002
0
-0.002
-0.004
0 2 4 6 8 10

Пример

$$\lambda = [-2.2617491893470287323; -2.2617491884157061577]$$

$$||\tilde{z}|| = [4.6254101101014102326; 4.6254101109068077591]$$

$$||\tilde{x}|| = [13.764081515531712441; 13.764081517696938661]$$

$$||\tilde{f}|| = [7.8467192615016712054; 7.8467192624511872268]$$

$$||\tilde{K}|| = [3.0774430884786188045; 3.0774430890838764263]$$

$$\max \Delta f = 0.004789058931374365986, \quad ||\Delta f|| = 0.0070844645098479305007$$

$$\max \Delta K = 0.02483216496552199075, \quad ||\Delta K|| = 0.074755500344717304386$$

$$||\tilde{R}|| = [1.97719681272735337; 1.9771968314635375297]$$

$$\frac{1}{1 + ||\tilde{R}||} = [0.33588642491884475484; 0.33588642703265526518]$$

$$||z - \tilde{z}|| \leqslant 0.027129933083957115656$$

$$\max \sigma \leqslant 0.64088201528889277014$$

$n = 10$, $m = 4$, затрачено 36.27сек.