Optimización Numérica sin restricciones

Tema 7: Introducción al Calculo Variacional

Oscar Dalmau

Centro de Investigación en Matemáticas
CIMAT

23 de abril de 2020

Orden del Tema

Problema con Valores en la Frontera

Encontrar $u(x)$ tal que

$$\begin{aligned} -u''(x) + \kappa u(x) &= f(x);\; x \in I = [0,1] \\ u(0) = a; \qquad & u(1) = b \end{aligned}$$

es equivalente a resolver

$$u^* = \arg\min_u J[u]$$

donde $u(0) = a$, $u(1) = b$ y

$$J[u] := \frac{1}{2}\int_0^1 \left(\kappa u(x)^2 - 2f(x)u(x) + \left(u'(x)\right)^2\right) dx$$

Problema con Valores en la Frontera

Nota que

$$J[u] \quad := \quad \frac{1}{2}\int_0^1 \left(\kappa u(x)^2 - 2f(x)u(x) + \left(u'(x)\right)^2\right) dx$$

se puede reescribir como

$$J[u] \quad := \quad \frac{\kappa}{2}\int_0^1 (u(x) - g(x))^2 + \frac{1}{\kappa}\left(u'(x)\right)^2 dx + cte$$

forma discreta

$$J(\mathbf{u}) \quad := \quad \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} (u_i - g_i)^2 + \frac{1}{2}\lambda \sum_{i=1}^{n-1} (u_{i+1} - u_i)^2$$

Brachistochrone

El inicio: En junio de 1696, John Bernoulli planteó el siguiente reto

Dado los puntos A y B encontrar el camino AMB que debe seguir un punto M, que se mueve bajo su propio peso, desde A hasta B en el menor (brachisto) tiempo (chrone) posible.

El problema anterior conduce a resolver el siguiente problema

$$\min_y J[y] = \frac{1}{\sqrt{2g}} \int_a^b \sqrt{\frac{1+(y')^2}{y_a - y}}\, dx$$

Soluciones enviadas: G. W. Leibniz (1697), Isaac Newton (1697), John Bernoulli (1697), James Bernoulli (1697) y Guillaume l'Hopital (1697).

La brachistochrone es un problema particular, del siguiente problema más general que conduce a *determinar una función* $y(x)$ *que minimice o maximice la siguiente integral*:

$$\text{min}_y J[y(x)] \;=\; \int_a^b f(x, y(x), y'(x))dx$$

Ejemplo

La curva mas corta en el plano

Cual es la curva mas corta entre dos puntos (a, y_a) y (b, y_b) en el plano.
Para lo anterior hay que minimizar el funcional de longitud de arco:

$$\min_y J[y] = \int_a^b \sqrt{1 + (y')^2} dx$$

Formulacion del problema

El objetivo es minimizar la siguiente integral definida:

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

sujeto a las condiciones de frontera

$$y(a) = y_a \qquad y(b) = y_b$$

$J[\cdot]$ es un funcional, ie, un operador que mapea funciones a un numero real

Espacios de funciones

Algunos espacios de funciones usados en el calculo variacional:

a) $C[a,b]$ el espacio de funciones real valuadas que son continuas en el intervalo $[a,b]$

b) $C^1[a,b]$ el espacio de funciones real valuadas que son continuas y que tienen derivadas continuas en en el intervalo $[a,b]$

c) $C^2[a,b]$ el espacio de funciones real valuadas que son continuas y que tienen primeras y segundas derivadas continuas en en el intervalo $[a,b]$

Estremo de funcional

Luego, el problema consiste en buscar el extremo de un funcional.

La palabra 'extremo' la introdujo Paul du Bois-Reymond (1879), para evitar repetir la expresión 'máximo o mínimo'

Orden del Tema

1. Introduccion
2. La primera Variación
    - Ecuacion de Euler-Lagrange
3. Ejemplo
4. Tarea

Metodo de Euler

La idea principal de Euler es convertir el problema variacional en un problema n-dimensional y luego pasar al limite $n \to \infty$

1.- Se divide el intervalo $[a, b]$ en $n+1$ subintervalos iguales $[x_i, x_{i+1}]$, es decir, $a = x_0, x_1, \cdots, x_n, x_{n+1} = b$

$$x_i = x_0 + i\Delta x$$

luego

$$\Delta x = x_{i+1} - x_i = \frac{b-a}{n+1}$$

pues

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_0 + (n+1)\Delta x \\ x_0 &= a \\ x_{n+1} &= b \end{aligned}$$

Metodo de Euler

2.- Reemplazar la funcion $y(x)$ por la poligonal $(x_0, y_0) = (a, y_a), (x_1, y_1), \cdots, (x_n, y_n), (x_{n+1}, y_{n+1}) = (b, y_b)$ donde $y_i = y(x_i)$

3.- Aproximar $J[y]$ mediante, $s_k = y_{k+1} - y_k$

$$J(\mathbf{y}) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i, y_i, \frac{s_i}{\Delta x})\Delta x$$

donde $y_1, y_2, \cdots, y_n$ son las incógnitas.

Metodo de Euler

3.- Calcular $\frac{\partial J(\cdot)}{\partial y_k}$ mediante

$$\begin{aligned} J(\cdot) &= \ldots + f(x_k, y_k, \frac{y_{k+1} - y_k}{\Delta x})\Delta x + \\ & f(x_k, y_{k-1}, \frac{y_k - y_{k-1}}{\Delta x})\Delta x + \ldots \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial J(\cdot)}{\partial y_k} &= f_y(x_k, y_k, \frac{s_k}{\Delta x})\Delta x - \frac{1}{\Delta x} f_{y'}(x_k, y_k, \frac{s_k}{\Delta x})\Delta x \\ & + \frac{1}{\Delta x} f_{y'}(x_{k-1}, y_{k-1}, \frac{s_{k-1}}{\Delta x})\Delta x \end{aligned}$$

Metodo de Euler

4.- Dividiendo por Δx y dando paso el limite

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\Delta x}\frac{\partial J(\cdot)}{\partial y_k} &= f_y(x_k, y_k, \frac{s_k}{\Delta x}) \\
&\quad - \frac{f_{y'}(x_k, y_k, \frac{s_k}{\Delta x}) - f_{y'}(x_{k-1}, y_{k-1}, \frac{s_{k-1}}{\Delta x})}{\Delta x} \\
x_k &\to x, \;\; y_k \to y, \;\; \frac{s_k}{\Delta x} \to y' \\
x_{k-1} &\to x, \;\; y_{k-1} \to y, \;\; \frac{s_{k-1}}{\Delta x} \to y'
\end{aligned}$$

5.- Se da paso el limite para obtener la *derivada variacional*

$$\frac{\delta J(\cdot)}{\delta y} = f_y(x, y, y') - \frac{\partial}{\partial x} f_{y'}(x, y, y')$$

Metodo de Euler

La derivada variacional juega el papel de la derivada parcial

6.- Se iguala a cero *derivada variacional* para obtener un minimo, lo que conduce a la **ecuacion de Euler-Lagrange**:

$$\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{d}{dx}\left(\frac{\partial f}{\partial y'}\right) = 0$$

Ejemplo

La curva mas corta en el plano

Cual es la curva mas corta entre dos puntos (a, y_a) y (b, y_b) en el plano.

$$J[y] = \int_a^b \sqrt{1 + (y')^2} dx$$

Ecuacion de Euler-Lagrange

$$\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{d}{dx}\left(\frac{\partial f}{\partial y'}\right) = 0$$

Ejemplo

Ecuacion de Euler-Lagrange

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{d}{dx}\left(\frac{\partial f}{\partial y'}\right) &= 0 \\
-\frac{d}{dx}\frac{y'}{\sqrt{1+(y')^2}} &= 0
\end{aligned}
$$

como se anula la derivada, la funcion es una constante ‘c’ y haciendo calculos

$$
\begin{aligned}
\frac{y'}{\sqrt{1+(y')^2}} &= c \\
y' &= \alpha
\end{aligned}
$$

y se concluye que $y = \alpha x + \beta$ (una recta)

Metodo de Lagrange

Derivacion de la ecuacion de Euler-Lagrange usando el Método de Lagrange. Se parte del problema siguiente

Minimizar la integral definida:

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

sujeto a las condiciones de frontera

$$y(a) = y_a \qquad y(b) = y_b$$

Metodo de Lagrange

Supongamos que $y = \hat{y}(x)$ resuelve el problema. Ahora se introduce una pequeña variacion $h(x)$

$$y(x) = \hat{y}(x) + h(x)$$

donde

$$h(a) = 0 \qquad h(b) = 0$$

Metodo de Lagrange

Las asunciones de Lagrange consideran pequeñas variaciones debiles, es decir

$$\begin{aligned} h(x) &= \epsilon\eta(x) \\ \eta(a) = 0, &\qquad \eta(b) = 0 \end{aligned}$$

donde $h(x)$, $h'(x)$ son del mismo orden (pequeños), $\eta(x)$ es independiente de ϵ y $\epsilon \approx 0$

Metodo de Lagrange

$$J(\epsilon) := J[\hat{y} + \epsilon\eta] \quad = \quad \int_a^b f(x, \hat{y} + \epsilon\eta, \hat{y}' + \epsilon\eta')dx$$

La variacion total es

$$\begin{aligned}
\Delta J &= J(\epsilon) - J(0) \\
&= \int_a^b f(x, \hat{y} + \epsilon\eta, \hat{y}' + \epsilon\eta')dx - \int_a^b f(x, \hat{y}, \hat{y}')dx \\
&= \int_a^b [f(x, \hat{y} + \epsilon\eta, \hat{y}' + \epsilon\eta')dx - f(x, \hat{y}, \hat{y}')]dx
\end{aligned}$$

Metodo de Lagrange

Usando Taylor alrededor de $\epsilon = 0$

$$J(\epsilon) = J(0) + \left(\frac{dJ}{d\epsilon}|_{\epsilon=0}\right)\epsilon + \frac{1}{2}\left(\frac{d^2J}{d\epsilon^2}|_{\epsilon=0}\right)\epsilon^2 + O(\epsilon^3)$$

Luego, de $\Delta J = J(\epsilon) - J(0)$ se tiene

$$\begin{aligned} \Delta J &= \delta J + \frac{1}{2}\delta^2 J + O(\epsilon^3) \\ \delta J &:= \left(\frac{dJ}{d\epsilon}|_{\epsilon=0}\right)\epsilon \\ \delta^2 J &:= \left(\frac{d^2J}{d\epsilon^2}|_{\epsilon=0}\right)\epsilon^2 \end{aligned}$$

donde δJ y $\delta^2 J$ son la primera y la segunda variación respectivamente

Metodo de Lagrange

La primera variacion es

$$\begin{aligned}\delta J &:= \left(\frac{dJ}{d\epsilon}\Big|_{\epsilon=0}\right)\epsilon \\ &= \epsilon\int_a^b [f_y(x,\hat{y},\hat{y}')\eta + f_{y'}(x,\hat{y},\hat{y}')\eta']dx\end{aligned}$$

Si $J(0) = J[\hat{y}]$ es un minimo, entonces $J(\epsilon) \geq J(0)$, es decir $\Delta J \geq 0$.

Nota: Si $a = bh + o(h)$ y $a \geq 0$ entonces $b = 0$.

Por lo tanto se tiene que cumplir que $\delta J = 0$

Metodo de Lagrange

Si $J(0) = J[\hat{y}]$ es un minimo, entonces $J(\epsilon) \geq J(0)$, es decir $\Delta J \geq 0$.
Como la primera variacion tiene un exponente impar en ϵ, podriamos modificar el signo anterior $\geq$ seleccionando ϵ positivo o negativo, por lo que $J(0)$ no seria un minimo, por lo tanto se tiene que cumplir que $\delta J = 0$ (Este es el mismo argumento usado para la condicion necesaria $\nabla f = 0$), ie,

$$J(\epsilon) \quad = \quad J(0) + \left(\frac{dJ}{d\epsilon}|_{\epsilon=0} \right) \epsilon + o(\epsilon)$$

como $o(\epsilon) \to 0$, si $J(0)$ es un minimo entonces $\delta J = \left(\frac{dJ}{d\epsilon}|_{\epsilon=0} \right) \epsilon = 0$.

Metodo de Lagrange

- Luego si hay un extremo es necesario que $\delta J = \left(\frac{dJ}{d\epsilon}|_{\epsilon=0}\right)\epsilon = 0$.
  Es decir $\frac{dJ}{d\epsilon}|_{\epsilon=0}$ = 0 donde $J(\epsilon) := J[\hat{y} + \epsilon\eta]$
- Al mismo tiempo, si es un minimo entonces $\delta^2 J \geq 0$, y si es un maximo entonces $\delta^2 J \leq 0$,

Nota: Sea $a = bh^2 + o(h^2)$ entoncs $a \geq 0$ si y solo si $b \geq 0$.

Metodo de Lagrange

Condicion necesaria de la primera variacion

Una condicion necesaria para que el funcional $J[y]$ tenga un minimo (maximo) local en $y = \hat{y}(x)$ es que la primera variacion de $J[y]$ se anule, es decir,

$$\delta J = 0,$$

para $y = \hat{y}(x)$ y para todas las variaciones admisible $\eta(x)$.

Simplificacion de Lagrange

Vamos a realizar una simplificacion a la primera variacion (simplificacion de Lagrange) que se basa en la integrtacion por partes

$$\begin{aligned}
\delta J &= \epsilon \int_a^b [f_y(x,\hat{y},\hat{y}')\eta + f_{y'}(x,\hat{y},\hat{y}')\eta']dx \\
\int_a^b f_{y'}(x,\hat{y},\hat{y}')\eta' dx &= f_{y'}(x,\hat{y},\hat{y}')\eta|_{x=a}^{x=b} - \int_a^b \frac{d}{dx} f_{y'}(x,\hat{y},\hat{y}')\eta dx \\
&= -\int_a^b \frac{d}{dx} f_{y'}(x,\hat{y},\hat{y}')\eta dx
\end{aligned}$$

pues $\eta(a) = \eta(b) = 0$

Simplificacion de Lagrange

Como la siguiente igualdad

$$\int_a^b [\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{d}{dx}\left(\frac{\partial f}{\partial y'}\right)]_{y=\hat{y},y'=\hat{y}'} \eta(x)dx \quad = \quad 0$$

se cumple para toda funcion η entonces necesariamente el coeficiente de eta tiene que ser cero, ie,

$$\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{d}{dx}\left(\frac{\partial f}{\partial y'}\right) \quad = \quad 0$$

Nota: Este fue el argumento de Lagrange, sin embargo en una carta de Euler a Lagrange le dice que esto no es evidente y que debe ser probado... La prueba la realizó Du Bois-Reymond en 1879 (Teorema fundamental del Calculo variacional)

Simplificacion de Lagrange

Teorema fundamental del Calculo variacional

Si $g(x) \in C^1[a,b]$ y si

$$\int_a^b g(x)\eta(x)dx = 0$$

para toda $\eta(x) \in C^1[a,b]$ tal que $\eta(a) = \eta(b) = 0$, entonces

$$g(x) = 0$$

para toda $x \in [a,b]$

Simplificacion de Lagrange

Supongamos, sin perdida de generalidad que existe un punto donde g sea positiva en (a, b). Entonces, por continuidad, existe un intervalo donde $g(x) > 0$ para $x \in [x_1, x_2] \subset [a, b]$. Definamos $\eta(x) = (x - x_1)^2(x - x_2)^2$ para $x \in [x_1, x_2]$ y $\eta(x) = 0$ para $x \notin [x_1, x_2]$, luego

$$\int_a^b g(x)\eta(x)dx = \int_{x_1}^{x_2} g(x)(x - x_1)^2(x - x_2)^2 dx > 0$$

pues $g(x)(x - x_1)^2(x - x_2)^2 > 0$ para $x \in [x_1, x_2]$, lo que es una contradiccion con la hipotesis. Por tanto $g(x) = 0$ para $x \in (a, b)$ y por la continuidad $g(a) = g(b) = 0$

Simplificacion de Lagrange

Comentario: Para poder aplicar el teorema anterior se debe garantizar que $g(x)$ sea continua en $[a, b]$. Aplicando la regla de la cadena

$$
\begin{aligned}
g(x) &= f_y - \frac{d}{dx} f_{y'} \\
&= f_y - \frac{\partial f_{y'}}{\partial x}\frac{dx}{dx} - \frac{\partial f_{y'}}{\partial y}\frac{dy}{dx} - \frac{\partial f_{y'}}{\partial y'}\frac{dy'}{dx} \\
&= f_y - \frac{\partial f_{y'}}{\partial x} - \frac{\partial f_{y'}}{\partial y} y' - \frac{\partial f_{y'}}{\partial y'} y''
\end{aligned}
$$

Luego hay que agregar una condicion mas y es que $\hat{y}'' \in C[a, b]$ o que $\hat{y} \in C^2[a, b]$. Finalmente se obtiene el siguiente Teorema

Condicion de Euler- Lagrange

Condicion necesaria de Euler-Lagrange

Las funciones $\hat{y} \in C^2[a,b]$ que producen un extremo de

$$J[y] \;=\; \int_a^b f(x,y,y')dx$$

satisfacen la ecuación diferencial de Euler -Lagrange

$$\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{d}{dx}\left(\frac{\partial f}{\partial y'}\right) \;=\; 0$$

Ejemplo 1. Usando la aproximacion poligonal de Euler

$$J[y] = \int_0^2 [(y')^2 + 6x^2 y]dx, \; y(0) = 2, \; y(2) = 4$$

Consideremos $n = 3$, $\Delta = (2-0)/(3+1) = 0{,}5$,
$x = [0; 0{,}5; 1; 1{,}5; 2]$, $\mathbf{y} = [2, y_1, y_2, y_3, 4]$

$$J(\mathbf{y}) = \sum_{i=0}^{n} [(\frac{y_{i+1} - y_i}{\Delta})^2 + 6x_i^2 y_i]$$

Ejemplo 1. Usando la aproximacion poligonal de Euler

$$
\begin{aligned}
J(\mathbf{y}) &= \sum_{i=0}^{n} [(\frac{y_{i+1} - y_i}{\Delta})^2 + 6x_i^2 y_i] \\
\frac{\partial J}{\partial y_1} &= 2\frac{y_1 - y_0}{\Delta^2} - 2\frac{y_2 - y_1}{\Delta^2} + 6x_1^2 \\
\frac{\partial J}{\partial y_2} &= 2\frac{y_2 - y_1}{\Delta^2} - 2\frac{y_3 - y_2}{\Delta^2} + 6x_2^2 \\
\frac{\partial J}{\partial y_3} &= 2\frac{y_3 - y_2}{\Delta^2} - 2\frac{y_4 - y_3}{\Delta^2} + 6x_3^2
\end{aligned}
$$

Ejemplo 1. Usando la aproximación poligonal de Euler

$$\begin{aligned} 2y_1 - y_2 + 0y_3 &= -3\Delta^2 x_1^2 + y_0 \\ -y_1 + 2y_2 - y_3 &= -3\Delta^2 x_2^2 \\ 0y_1 - y_2 + 2y_3 &= -3\Delta^2 x_3^2 + y_4 \end{aligned}$$

Resolviendo $\mathbf{y} = [2{,}0; 1{,}5625; 1{,}3125; 1{,}8125; 4{,}0]'$

Ejemplo 1. Usando Euler-Lagrange

$$J[y] = \int_0^2 [(y')^2 + 6x^2 y]dx,\ y(0) = 2,\ y(2) = 4$$

$$\begin{aligned} f(x, y, y') &= (y')^2 + 6x^2 y \\ 0 &= f_y - \frac{d}{dx} f_{y'} = 6x^2 - 2\frac{d}{dx} y' = 6x^2 - 2y'' \\ y'' &= 3x^2 \\ y &= \frac{1}{4}x^4 + ax + b \end{aligned}$$

Luego $b = 2$, $a = -1$

Ejemplo 1. Usando Euler-Lagrange

Solucion exacta

$$y = \frac{1}{4}x^4 - x + 2$$

Evaluando $\mathbf{x} = [0; 0{,}5; 1; 1{,}5; 2]$ se obtiene
$\mathbf{y} = [2{,}0; 1{,}5156, 1{,}2500, 1{,}7656; 4{,}0]'$

Ejemplo 1. Usando Euler-Lagrange

Solucion aproximada

$$\begin{aligned} y'' &= 3x^2 \\ \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} &= 3x_i^2 \end{aligned}$$

Luego

$$\begin{aligned} 2y_1 - y_2 + 0y_3 &= -3h^2x_1^2 + y_0 \\ -y_1 + 2y_2 - y_3 &= -3h^2x_2^2 \\ 0y_1 - y_2 + 2y_3 &= -3h^2x_3^2 + y_4 \end{aligned}$$

donde $h = \Delta$. El sistema anterior coincide con el obtenido por el Método de Euler.

Tarea

1. Derivar las ecuaciones de Euler Lagrange usando el Método de Lagrange de

$$\int_x \int_y F(x, y, f, f_x, f_y) dx dy$$

$$\int_x \int_y F(x, y, u, v, u_x, v_x, u_y, v_y) dx dy$$

donde $f, u, v : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$

$$\begin{aligned} f_x &= \frac{\partial f}{\partial x}, \quad f_y = \frac{\partial f}{\partial y} \\ u_x &= \frac{\partial u}{\partial x}, \quad u_y = \frac{\partial u}{\partial y} \\ v_x &= \frac{\partial v}{\partial x}, \quad v_y = \frac{\partial v}{\partial y} \end{aligned}$$

Tarea

1. Obtener las ecuaciones de Euler-Lagrange de

$$\int_x \int_y (f-g)^2 + \lambda \|\nabla f\|^2) dxdy$$

$$\int_x \int_y (p - q - p_x u - q_x v)^2 + \lambda(\|\nabla u\|^2 + \|\nabla v\|^2) dxdy$$

donde $f, u, v : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ y $g, p, q : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ son funciones dadas.