

# **Nelineární optimalizace a numerické metody (MI–NON)**

**Magisterský program: Informatika**

**Obor: Teoretická informatika**

**Katedra: 18101 Katedra teoretické informatiky**

Jaroslav Kruis

---

Evropský sociální fond

Praha & EU: Investujeme do vaší budoucnosti



# Diferenciální rovnice

- obyčejné diferenciální rovnice
- parciální diferenciální rovnice
  - eliptické
  - parabolické
  - hyperbolické

Karel Rektorys a spolupracovníci. *Přehled užití matematiky II.*  
Nakladatelství Prometheus, Praha, 7. vydání, 2000. ISBN  
80-7196-181-7.

## Obyčejné diferenciální rovnice

**Definice.** Necht  $F$  je daná spojitá funkce  $n + 2$  proměnných.

Rovnice

$$F \left( x, u(x), \frac{du(x)}{dx}, \dots, \frac{d^n u(x)}{dx^n} \right) = 0$$

se nazývá obyčejná diferenciální rovnice  $n$ -tého řádu,  $u(x)$  je neznámá funkce.

**Příklad.** Rovnice

$$\left( \frac{d^2 u(x)}{dx^2} \right)^2 + x \frac{du(x)}{dx} = 0$$

je obyčejná diferenciální rovnice druhého řádu. Je to nelineární rovnice.

**Definice.** Lineární obyčejná diferenciální rovnice  $n$ -tého řádu s konstantními koeficienty je rovnice ve tvaru

$$a_n \frac{d^n u(x)}{dx^n} + a_{n-1} \frac{d^{n-1} u(x)}{dx^{n-1}} + \dots + a_1 \frac{du(x)}{dx} + a_0 u(x) = f(x)$$

**Příklad.** Rovnice

$$m \frac{d^2 u(t)}{dt^2} + c \frac{du(t)}{dt} + ku(t) = F \sin \omega t$$

je pohybová rovnice popisující vynucené tlumené kmitání hmoty. Je to rovnice druhého řádu s konstantními koeficienty.

# **Numerické metody pro řešení diferenciálních rovnic**

- metoda konečných diferencí
- metoda konečných prvků
- metoda hraničních prvků
- metoda konečných objemů

## Metoda konečných diferencí

### Diferenční náhrady

$$f(x + h) \approx f(x) + \frac{df(x)}{dx}h + \frac{1}{2} \frac{d^2f(x)}{dx^2}h^2$$

$$f(x - h) \approx f(x) - \frac{df(x)}{dx}h + \frac{1}{2} \frac{d^2f(x)}{dx^2}h^2$$

$$\frac{df(x)}{dx} \approx \frac{f(x + h) - f(x - h)}{2h}$$

$$\frac{d^2f(x)}{dx^2} \approx \frac{f(x + h) - 2f(x) + f(x - h)}{h^2}$$

Obvykle se používá pravidelná síť bodů, ve které platí  $x_i = ih$ , kde  $h$  je vzdálenost dvou sousedních uzlů. Z toho plyne značení  $f_i = f(x_i)$ . Diferenční náhrady lze proto psát ve tvaru

$$\begin{aligned}\frac{df_i}{dx} &\approx \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} \\ \frac{d^2f_i}{dx^2} &\approx \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2}\end{aligned}$$

**Příklad.** Metodou konečných diferencí řešte diferenciální rovnici

$$k \frac{d^2 u(x)}{dx^2} + f = 0$$

s okrajovými podmínkami  $u(0) = 0$  a  $\frac{du(l)}{dx} = 0$ .  $k$  a  $f$  jsou konstanty.

**Řešení.** Zadanou obyčejnou diferenciální rovnici lze vyřešit přesně.

Dvojitou integrací vychází

$$u(x) = -\frac{f}{k} \frac{x^2}{2} + C_1 x + C_2$$

kde  $C_1$  a  $C_2$  jsou integrační konstanty, které se určí z okrajových



podmínek. Tedy

$$\begin{aligned} u(0) = C_2 = 0 &\quad \Rightarrow \quad C_2 = 0 \\ \frac{du(0)}{dx} = -\frac{f}{k}l + C_1 = 0 &\quad \Rightarrow \quad C_1 = \frac{fl}{k} \end{aligned}$$

Přesné řešení dané diferenciální rovnice je tedy

$$u(x) = -\frac{f}{k} \frac{x^2}{2} + \frac{fl}{k} x$$

Označení

$$u_0 = u(0) = 0$$

$$u_1 = u(h) = u\left(\frac{l}{2}\right)$$

$$u_2 = u(2h) = u(l)$$

$$u_3 = u(3h)$$

Poznámka:  $u_0$  plyne z první okrajové podmínky,  $u_3$  je mimo řešenou oblast, získá se z druhé okrajové podmínky.

$$\frac{du(l)}{dx} = \frac{1}{2h}(u_3 - u_1) = 0 \quad u_3 = u_1$$

Užitím diferenčních náhrad vychází

$$\frac{k}{h^2}(u_0 - 2u_1 + u_2) + f = 0$$

$$\frac{k}{h^2}(u_1 - 2u_2 + u_3) + f = 0$$

$$\frac{k}{h^2}(-2u_1 + u_2) + f = 0$$

$$\frac{k}{h^2}(2u_1 - 2u_2) + f = 0$$

Uzlové hodnoty

$$\begin{aligned} u_0 &= 0 \\ u_1 &= \frac{3}{8} \frac{fl^2}{k} \\ u_2 &= \frac{1}{2} \frac{fl^2}{k} \end{aligned}$$

## Operátory, funkcionály, extrémy funkcionálů

K. Rektorys. *Variační metody v inženýrských problémech a problémech matematické fyziky*. Academia Praha, 1999. ISBN 80-200-0714-8.

**Definice.** Množina  $V$  se nazývá lineární prostor (vektorový prostor, lineál) právě tehdy, když platí

- $\forall u, v \in V : u + v = v + u$
- $\forall u, v, w \in V : u + (v + w) = (u + v) + w$
- $\exists 0 \in V, \forall u \in V : u + 0 = 0 + u = u$
- $\forall u \in V : 1 \cdot u = u$
- $\forall u, v \in V, \forall \alpha \in R : \alpha(u + v) = \alpha u + \alpha v$

- $\forall u \in V, \forall \alpha, \beta \in R : \alpha(\beta u) = (\alpha\beta)u$
- $\forall u \in V, \forall \alpha, \beta \in R : (\alpha + \beta)u = \alpha u + \beta u$

**Definice.** Lineární prostor je vybaven skalárním součinem, který se označuje  $(u, v)$ , právě tehdy, když

- $\forall u, v \in V : (u, v) = (v, u)$
- $\forall u, v, w \in V, \forall \alpha, \beta \in R : (\alpha u + \beta v, w) = \alpha(u, w) + \beta(v, w)$
- $\forall u \in V : (u, u) \geq 0$
- $\forall u \in V : (u, u) = 0 \Leftrightarrow u = 0$

**Definice.** Je-li prostor  $V$  vybaven skalárním součinem, norma prvku  $u \in V$  je definována  $\|u\| = \sqrt{(u, u)}$ .

**Definice.** Je-li prostor  $V$  vybaven normou, metrika (vzdálenost) prvků  $u, v \in V$  je definována  $\rho(u, v) = \|u - v\| = \sqrt{(u, u)}$ .

**Definice.** Posloupnost prvků  $u_i \in V$  konverguje k prvku  $u \in V$  právě tehdy, když  $\lim_{i \rightarrow \infty} \rho(u_i, u) = 0$ .

**Definice.** Posloupnost prvků  $u_i \in V$  se nazývá cauchyovská právě tehdy, když platí  $\lim_{i \rightarrow \infty, j \rightarrow \infty} \rho(u_i, u_j) = 0$ .

**Definice.** Prostor  $V$  se nazývá úplný právě tehdy, když každá cauchyovská posloupnost  $u_i \in V$  konverguje k nějakému prvku  $u \in V$ .

**Definice.** Úplný lineární prostor se skalárním součinem se nazývá Hilbertův prostor.

**Definice.** Necht' jsou dány dvě množiny  $M_1, M_2$ . Operátor je zobrazení z  $M_1$  do  $M_2$  a píše se  $v = Au$ , kde  $v \in M_2$  a  $u \in M_1$ . Množina  $M_1$  se nazývá definiční obor operátoru, množina  $M_2$  se nazývá obor hodnot.

**Příklad.** Necht'  $M_1 = R^n, M_2 = R^m$ . Matice  $A \in R^{m \times n}$  je operátor z  $M_1$  do  $M_2$  a platí  $v = Au$ , kde  $u \in R^n$  a  $v \in R^m$ .

**Příklad.** Necht' je  $M_1$  i  $M_2$  množina všech nekonečněkrát diferencovatelných funkcí jedné proměnné. Derivace je operátor z  $M_1$  do  $M_2$  a platí  $A = \frac{d}{dx}$ , čili  $v = Au = \frac{du}{dx}$ .

**Definice.** Operátor  $A$  se nazývá lineární právě tehdy, když pro každé prvky  $u, v$  z definičního oboru a pro libovolná čísla  $\alpha, \beta$  platí

$$A(\alpha u + \beta v) = \alpha Au + \beta Av$$



## Operátory v Hilbertových prostorech

**Definice.** Množina  $M$  se nazývá hustá v  $D$ , jestliže ke každému bodu  $u \in D$  lze najít posloupnost bodů  $u_n \in M$ , konvergující v  $D$  k  $u$ .

**Příklad.** Množina všech mnohočlenů je hustá v prostoru funkcí  $L_2(G)$ .

**Definice.** Lineární operátor definovaný na husté podmnožině  $D$  Hilbertova prostoru  $H$  se nazývá symetrický právě tehdy, když pro každou dvojici prvků  $u, v \in D$  platí  $(Au, v) = (u, Av)$ .

**Definice.** Operátor se nazývá pozitivní ve svém definičním oboru  $D$ , je-li symetrický a platí-li pro všechny prvky z  $D$  nerovnost  $(Au, u) \geq 0$ , přičemž  $(Au, u) = 0 \Rightarrow u = 0$ .

**Definice.** Operátor se nazývá pozitivně definitní ve svém definičním oboru  $D$ , je-li symetrický a platí-li pro všechny prvky z  $D$  nerovnost  $(Au, u) \geq C^2(u, u)$ , kde  $C > 0$  je konstanta (pro všechny prvky z  $D$  stejná).

**Příklad.** Necht' je dána obyčejná diferenciální rovnice druhého řádu s konstantními koeficienty

$$k \frac{d^2 u(x)}{dx^2} + f(x) = 0$$

kde  $k > 0$  a  $f(x)$  je daná funkce. Okrajové podmínky jsou  $u(0) = 0, u'(l) = 0$ .

Danou diferenciální rovnici lze přepsat s pomocí operátoru

$$A = -k \frac{d^2}{dx^2} \text{ do tvaru}$$

$$Au(x) = f(x)$$

Operátor  $A$  je definován na prostoru spojitých diferencovatelných funkcí splňujících okrajové podmínky.

Skalární součin  $(Au, v)$  má pro tento konkrétní případ tvar

$$\begin{aligned}(Au(x), v(x)) &= - \int_0^l k \frac{d^2 u(x)}{dx^2} v(x) dx = \\&= - \left[ k \frac{du(x)}{dx} v(x) \right]_0^l + \int_0^l k \frac{du(x)}{dx} \frac{dv(x)}{dx} dx = \\&= \left[ k \frac{dv(x)}{dx} u(x) \right]_0^l - \int_0^l k \frac{d^2 v(x)}{dx^2} u(x) dx = (u, Av)\end{aligned}$$

Operátor je tedy symetrický.

Dále je vidět, že platí

$$\begin{aligned}(Au(x), u(x)) &= - \int_0^l k \frac{d^2 u(x)}{dx^2} u(x) dx = \\&= - \left[ k \frac{du(x)}{dx} u(x) \right]_0^l + \int_0^l k \left( \frac{du(x)}{dx} \right)^2 dx = \\&= \int_0^l k \left( \frac{du(x)}{dx} \right)^2 dx \geq 0\end{aligned}$$

Nyní je třeba ukázat, že platí  $(Au, u) = 0 \Leftrightarrow u = 0$ . Necht' tedy platí  $(Au, u) = 0$ , tj.

$$(Au(x), u(x)) = \int_0^l k \left( \frac{du(x)}{dx} \right)^2 dx = 0$$

Protože je  $u$  spojitá, plyne z předchozí rovnice, že  $u = \text{konst.}$  Navíc

musí funkce  $u$  splnit okrajové podmínky, takže  $u = 0$ . Operátor  $A$  je tedy pozitivní.

Ověření pozitivní definitnosti je náročnější a lze ho nalézt v literatuře.

Necht' je dán operátor  $B = -k \frac{d^2}{dx^2}$  na prostoru spojitých diferencovatelných funkcí. Okrajové podmínky nejsou brány nyní v úvahu. Operátor  $B$  je odlišný od operátoru  $A$ , i když mají stejný tvar. Liší se ale jejich definiční obory.

Skalární součin  $(Bu, v)$  má pro tento konkrétní případ tvar

$$\begin{aligned}
 (Bu(x), v(x)) &= - \int_0^l k \frac{d^2 u(x)}{dx^2} v(x) dx = \\
 &= - \left[ k \frac{du(x)}{dx} v(x) \right]_0^l + \int_0^l k \frac{du(x)}{dx} \frac{dv(x)}{dx} dx = \\
 &= -k \frac{du(0)}{dx} v(0) + k \frac{du(l)}{dx} v(l) + \int_0^l k \frac{du(x)}{dx} \frac{dv(x)}{dx} dx \\
 (u(x), Bv(x)) &= - \int_0^l k \frac{d^2 v(x)}{dx^2} u(x) dx = \\
 &= - \left[ k \frac{dv(x)}{dx} u(x) \right]_0^l + \int_0^l k \frac{dv(x)}{dx} \frac{du(x)}{dx} dx = \\
 &= -k \frac{dv(0)}{dx} u(0) + k \frac{dv(l)}{dx} u(l) + \int_0^l k \frac{du(x)}{dx} \frac{dv(x)}{dx} dx
 \end{aligned}$$

Obecně platí

$$-k \frac{du(0)}{dx} v(0) + k \frac{du(l)}{dx} v(l) \neq -k \frac{dv(0)}{dx} u(0) + k \frac{dv(l)}{dx} u(l)$$

Například pro  $u(x) = x$  a  $v(x) = x^2$  vychází

$$-k \frac{du(0)}{dx} v(0) + k \frac{du(l)}{dx} v(l) = -k \cdot 1 \cdot 0 + k \cdot 1 \cdot l^2 = kl^2$$

$$-k \frac{dv(0)}{dx} u(0) + k \frac{dv(l)}{dx} u(l) = -k \cdot 0 \cdot 0 + k \cdot 2l \cdot l = 2kl^2$$

Operátor tedy není symetrický.



## Funkcionály

**Definice.** Necht  $V$  je prostor funkcí. Zobrazení z  $V$  do  $\mathbb{R}$  se nazývá funkcionál.

**Příklad.** Necht  $V$  je prostor všech reálných funkcí jedné proměnné integrovatelných na intervalu  $(a, b)$ . Příkladem funkcionálu je určitý integrál  $\Pi(f(x)) = \int_a^b f(x)dx$ .

**Příklad.** Necht  $V$  je prostor všech reálných funkcí jedné proměnné definovaných na intervalu  $(a, b)$ . Příkladem funkcionálu je zobrazení  $\Pi(f(x)) = f(c)$ , tedy každé funkci  $f(x) \in V$  je přiřazena její funkční hodnota v bodě  $c \in (a, b)$ .

**Definice.** Necht' je dán pozitivní operátor  $A$  na prostoru  $H$ .

Funkcionál definovaný pomocí skalárního součinu ve tvaru

$\Pi(u(x)) = (Au, u) - 2(u, f)$  se nazývá kvadratický funkcionál.

**Definice.** Necht' je funkcionál  $\Pi$  definován na podmnožině  $M$  lineárního normovaného prostoru  $V$  a necht'  $f(x) \in M$  a  $\varphi \in V$ .

Limita

$$\begin{aligned} \frac{d\Pi(f(x))}{d\varphi(x)} &= d\Pi(f(x), \varphi(x)) = \\ &= \lim_{s \rightarrow 0} \frac{1}{s} (\Pi(f(x) + s\varphi(x)) - \Pi(f(x))) \end{aligned}$$

se nazývá derivace funkcionálu  $\Pi$  podle  $\varphi(x)$ . Někdy se tato limita nazývá Gateauxova derivace, někdy variace funkcionálu.

**Definice.** Nechť je funkcionál  $\Pi$  definován na lineárním normovaném prostoru  $V$ . Funkcionál  $\Pi$  má v bodě  $f(x)$  lokální minimum právě tehdy, když existuje okolí  $U(f(x))$  funkce  $f(x)$  takové, že pro všechny funkce  $g(x)$  z  $U(f(x)) - f(x)$  platí  $\Pi(g(x)) > \Pi(f(x))$ .

**Věta.** (Eulerova nutná podmínka pro extrém). Nechť má funkcionál  $\Pi$  definovaný na podmnožině  $M$  lineárního normovaného prostoru  $V$  v bodě  $f(x) \in M$  lokální extrém. Pak  $d\Pi(f(x), \varphi(x)) = 0$  pro všechny funkce  $\varphi(x) \in V$ , pro které derivace existuje.

**Příklad.** Eulerova nutná podmínka pro funkcionál

$$\Pi(u(x)) = \frac{1}{2} \int_0^l k \left( \frac{du(x)}{dx} \right)^2 dx - \int_0^l f(x)u(x)dx$$

Funkcionál  $\Pi(u(x))$  je definován pro funkce  $u(x)$  integrovatelné na intervalu  $(0, l)$ , kde  $l$  je konstanta.  $k$  je konstanta,  $f(x)$  je daná funkce integrovatelná na intervalu  $(0, l)$ .

Derivace funkcionálu má tvar

$$\begin{aligned}\frac{d\Pi(u(x))}{d\varphi(x)} &= \lim_{s \rightarrow 0} \frac{1}{s} (\Pi(u(x) + s\varphi(x)) - \Pi(u(x))) = \\ &= \lim_{s \rightarrow 0} \frac{1}{s} \left( \left[ \frac{1}{2} \int_0^l k \left\{ \left( \frac{du(x)}{dx} \right)^2 + 2s \frac{du(x)}{dx} \frac{d\varphi(x)}{dx} + s^2 \left( \frac{d\varphi(x)}{dx} \right)^2 \right\} dx - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \int_0^l f(x)(u(x) + s\varphi(x)) dx \right] - \right. \\ &\quad \left. - \left[ \frac{1}{2} \int_0^l k \left( \frac{du(x)}{dx} \right)^2 dx - \int_0^l f(x)u(x) dx \right] \right)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{d\Pi(u(x))}{d\varphi(x)} &= \int_0^l k \frac{du(x)}{dx} \frac{d\varphi(x)}{dx} dx - \int_0^l f(x) \varphi(x) dx = \\
 &= \left[ k \frac{du(x)}{dx} \varphi(x) \right]_0^l - \int_0^l k \frac{d^2u(x)}{dx^2} \varphi(x) dx - \int_0^l f(x) \varphi(x) dx = \\
 &= - \int_0^l \left( k \frac{d^2u(x)}{dx^2} + f(x) \right) \varphi(x) dx = 0
 \end{aligned}$$

$$k \frac{d^2u(x)}{dx^2} + f(x) = 0$$

# Metoda konečných prvků

**Příklad.** Metodou konečných prvků řešte diferenciální rovnici

$$k \frac{d^2 u(x)}{dx^2} + f = 0$$

s okrajovými podmínkami  $u(0) = 0$  a  $\frac{du(l)}{dx} = 0$ .  $k$  a  $f$  jsou konstanty.

**Řešení.** Zadanou obyčejnou diferenciální rovnici lze vyřešit přesně. Dvojitou integrací vychází

$$u(x) = -\frac{f}{k} \frac{x^2}{2} + C_1 x + C_2$$

kde  $C_1$  a  $C_2$  jsou integrační konstanty, které se určí z okrajových

podmínek. Tedy

$$u(0) = C_2 = 0 \quad \Rightarrow \quad C_2 = 0$$

$$\frac{du(0)}{dx} = -\frac{f}{k}l + C_1 = 0 \quad \Rightarrow \quad C_1 = \frac{fl}{k}$$

Přesné řešení dané diferenciální rovnice je tedy

$$u(x) = -\frac{f}{k} \frac{x^2}{2} + \frac{fl}{k} x$$

Dříve bylo ukázáno, že zadaná diferenciální rovnice

$$k \frac{d^2 u(x)}{dx^2} + f = 0$$



je Eulerovou podmínkou pro extrém funkcionálu

$$\Pi(u(x)) = \frac{1}{2} \int_0^l k \left( \frac{du(x)}{dx} \right)^2 dx - \int_0^l f(x)u(x)dx$$

Funkcionál  $\Pi$  nabývá minimální hodnoty pro funkci  $u(x)$ , která řeší danou diferenciální rovnici. Řešení dané diferenciální rovnice a minimalizace příslušného funkcionálu vedou tedy ke stejnému cíli.

Minimalizace funkcionálu se jeví výrazně snadnější než řešení diferenciální rovnice.

Minimalizace funkcionálu bude provedena pomocí aproximační funkce ve tvaru

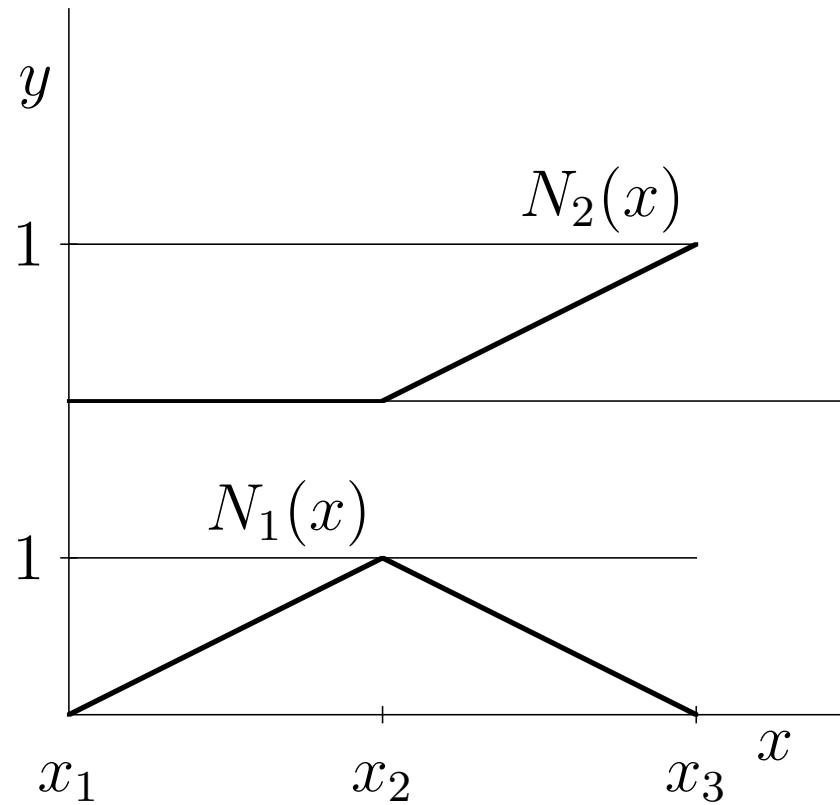
$$u(x) = N_2(x)d_2 + N_3(x)d_3$$

kde  $N_2(x)$  a  $N_3(x)$  jsou dané aproximační funkce a  $d_2$  a  $d_3$  jsou neznámé konstanty. Aproximační funkce má tvar lineární kombinace

$$u(x) = N_2(x)d_2 + N_3(x)d_3$$

Jednotlivé aproximační funkce mají tvar

$$N_2(x) = \begin{cases} \frac{x - x_1}{x_2 - x_1}, & x \in (x_1, x_2) \\ \frac{x_3 - x}{x_3 - x_2}, & x \in (x_2, x_3) \end{cases}$$
$$N_3(x) = \frac{x - x_2}{x_3 - x_2}, \quad x \in (x_2, x_3)$$



Dosazení aproximace do funkcionálu vychází

$$\begin{aligned}\Pi(d_2, d_3) &= \frac{1}{2} \int_0^l k \left( \frac{dN_2(x)}{dx} d_2 + \frac{dN_3(x)}{dx} d_3 \right)^2 dx - \\ &\quad - \int_0^l f(N_2(x)d_2 + N_3(x)d_3) dx\end{aligned}$$

jedná se o kvadratickou funkci dvou proměnných  $d_2$  a  $d_3$ . Jednotlivé

integrály mají tvar

$$\int_0^l \left( \frac{dN_2(x)}{dx} \right)^2 dx = \frac{4}{l}$$

$$\int_0^l \frac{dN_2(x)}{dx} \frac{dN_3(x)}{dx} dx = -\frac{2}{l}$$

$$\int_0^l \left( \frac{dN_3(x)}{dx} \right)^2 dx = \frac{2}{l}$$

$$\int_0^l f N_2(x) dx = \frac{fl}{2}$$

$$\int_0^l f N_3(x) dx = \frac{fl}{4}$$

$$\Pi(d_2, d_3) = 2\frac{k}{l}d_2^2 - 2\frac{k}{l}d_2d_3 + \frac{k}{l}d_3^2 - \frac{fl}{2}d_2 - \frac{fl}{4}d_3$$

Podmínky stacionarity

$$\frac{\partial \Pi(d_2, d_3)}{\partial d_2} = 4\frac{k}{l}d_2 - 2\frac{k}{l}d_3 - \frac{fl}{2} = 0$$

$$\frac{\partial \Pi(d_2, d_3)}{\partial d_3} = -2\frac{k}{l}d_2 + 2\frac{k}{l}d_3 - \frac{fl}{4} = 0$$

Maticový zápis soustavy algebraických rovnic

$$\begin{pmatrix} 4\frac{k}{l} & -2\frac{k}{l} \\ -2\frac{k}{l} & 2\frac{k}{l} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_2 \\ d_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{fl}{4} \\ \frac{fl}{2} \end{pmatrix}$$

Řešení soustavy rovnic je

$$d_2 = \frac{3}{8} \frac{fl^2}{k}$$

$$d_3 = \frac{1}{2} \frac{fl^2}{k}$$

