

Univerzita Karlova v Praze  
Matematicko-fyzikální fakulta

## BAKALÁŘSKÁ PRÁCE



David Nádhera

### **Kontinuace implicitně zadané křivky**

Katedra numerické matematiky

Vedoucí bakalářské práce: Doc. RNDr. Vladimír Janovský DrSc.  
Studijní program: Numerická a výpočtová matematika

2007

Děkuji panu doc. Janovskému za pomoc a cenné rady při tvorbě této práce.

Prohlašuji, že jsem svou bakalářskou práci napsal samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů. Souhlasím se zapůjčováním práce a jejím zveřejňováním.

V Praze dne 29.5.2007

David Nádhera

# Obsah

<b>1</b>	<b>Úvod</b>	<b>5</b>
1.1	Úvodní pojmy a značení . . . . .	5
1.2	Homotopické metody . . . . .	6
<b>2</b>	<b>Implicitně zadané křivky</b>	<b>8</b>
2.1	Věta o implicitních funkcích . . . . .	8
2.2	Křivka v $\mathbf{R}^n$ . . . . .	8
2.3	Tečný vektor a orientace křivky . . . . .	10
2.4	Limitní a bifurkační body . . . . .	12
<b>3</b>	<b>Kontinuace křivek</b>	<b>14</b>
3.1	Metody typu prediktor-korektor . . . . .	14
3.2	Pseudoarclength kontinuace . . . . .	15
3.3	Moore-Penroseova kontinuace . . . . .	16
3.4	Použití QR rozkladu . . . . .	19
3.5	Adaptivní volba délky kroku . . . . .	21
3.6	Věty o konvergenci . . . . .	21
<b>4</b>	<b>Příklady</b>	<b>24</b>
4.1	Elastica . . . . .	24
4.2	Eutrofizační model . . . . .	31
<b>5</b>	<b>Závěr</b>	<b>36</b>
	<b>Literatura</b>	<b>37</b>

Název práce: Kontinuace implicitně zadané křivky

Autor: David Nádhera

Katedra (ústav): Katedra numerické matematiky

Vedoucí bakalářské práce: Doc. RNDr. Vladimír Janovský DrSc.

e-mail vedoucího: janovsky@karlin.mff.cuni.cz

Abstrakt: Tato práce se zabývá řešením problému numerické kontinuace implicitně zadaných křivek v  $n$ -dimensionálním prostoru pomocí metod typu prediktor-korektor. Tyto metody nacházejí uplatnění při hledání stacionárních řešení soustav obyčejných diferenciálních rovnic s jedním parametrem. Dalším možným využitím jsou homotopické metody pro hledání řešení soustav nelineárních rovnic. První část se věnuje některým vlastnostem křivek a numerickým aspektům jejich procházení. V druhé části jsou pak popsány příklady aplikací na konkrétní problémy, jmenovitě na matematický model borcení nosníku a eutrofizační model vodních ploch. Pro všechny numerické výpočty byl použit softwarový balík **MATCONT**.

Klíčová slova: numerická kontinuace, křivka v  $\mathbf{R}^n$ , metody typu prediktor-korektor, **MATCONT**

Title: Continuation of an implicitly defined curve

Author: David Nádhera

Department: Department of Numerical Mathematics

Supervisor: Doc. RNDr. Vladimír Janovský DrSc.

Supervisor's e-mail address: janovsky@karlin.mff.cuni.cz

Abstract: This work is on the problem of numerical continuation of implicitly defined curves in  $n$ -dimensional space by predictor-corrector methods. These methods are useful when one wants to find the equilibrium of ODE systems with one parameter. The homotopic methods for systems of nonlinear equations are another possible application. In the first part we will study some properties of curves and numerical aspects of their tracing. In the second part we will look at some real examples, namely the mathematical model of a girder buckling and an eutrophication model of flat lakes. All numerical examples have been calculated by software package **MATCONT**.

Keywords: numerical continuation, curve in  $\mathbf{R}^n$ , predictor-corrector methods, **MATCONT**

# Kapitola 1

## Úvod

Nechť  $F : \mathbf{R}^{n+1} \rightarrow \mathbf{R}^n$  je hladké zobrazení. Za jistých podmínek kladených na regularitu zobrazení  $F$  nám množina  $F^{-1}(0)$  lokálně definuje křivku v  $\mathbf{R}^{n+1}$ . Problematikou křivek v  $\mathbf{R}^n$  a důsledky věty o implicitních funkcích se budeme podrobněji věnovat v kapitole 2.

Kontinuační metody jsou numerické techniky, které nám pro zadané  $x \in F^{-1}(0)$  umožňují numericky aproximovat další body této křivky. V zásadě máme dva možné způsoby řešení. Buď převedeme úlohu na jistou diferenciální rovnici, kterou pak řešíme pomocí metod typu prediktor-korektor, nebo aproximací zobrazení  $F$  jistým po částech lineárním zobrazením. My se budeme v kapitole 3 věnovat zejména prvnému přístupu.

Ve čtvrté kapitole pak přistoupíme k aplikaci na konkrétní příklady.

### 1.1 Úvodní pojmy a značení

Nejdříve si zopakujeme některé základní pojmy používané v této práci a ujasníme používané značení.

**Definice 1.1** (Jacobiho matice). *Nechť  $F : \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^m$  je  $\mathcal{C}^1$  funkce,  $x \in \mathbf{R}^n$ . Matice*

$$F'(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial x_1}(x) & \dots & \frac{\partial F_1}{\partial x_n}(x) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial F_m}{\partial x_1}(x) & \dots & \frac{\partial F_m}{\partial x_n}(x) \end{pmatrix} \quad (1.1)$$

*nazveme Jacobiho maticí funkce  $F$  v bodě  $x$ .*

Je-li  $F(x, \alpha)$  funkce závislá na parametru  $\alpha$ , budeme značit  $F_x(x, \alpha)$  Jacobiho maticí s derivacemi pouze podle  $x$ -ové složky.

**Definice 1.2.** Řekneme, že

$$F(h) = O(h^n), \quad (1.2)$$

pokud existují konstanty  $h_0 > 0$  a  $C > 0$  takové, že pro všechna  $h < h_0$  platí

$$\|F(h)\| \leq C|h|^n. \quad (1.3)$$

**Definice 1.3** (unitární matice). Řekneme, že matice  $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$  je unitární, pokud

$$AA^T = A^T A = I, \quad (1.4)$$

kde  $I$  je jednotková matice.

**Definice 1.4** (stacionární řešení). Řekneme, že  $u(t)$  je stacionární řešení diferenciální rovnice

$$\dot{u}(t) = F(u, t), \quad (1.5)$$

pokud

$$u(t) = \text{const.} \quad (1.6)$$

Stejně definujeme i stacionární řešení soustavy diferenciálních rovnic.

## 1.2 Homotopické metody

V této úvodní kapitole nastíníme jednu z motivací, proč se zabývat metodami pro kontinuaci křivek.

Uvažujme soustavu  $n$  obecně nelineárních rovnic o  $n$  neznámých

$$F(x) = 0, \quad (1.7)$$

kde  $F : \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^n$  je dostatečně hladké zobrazení. V této práci budeme většinou požadovat, aby hladká zobrazení byla třídy  $\mathcal{C}^1$ , tj. aby všechny parciální derivace byly spojité. Jednou z možností, jak získat nulové body zobrazení  $F$  je použití Newtonovy iterační metody, definované vzorcem

$$x_{i+1} := x_i - F'(x_i)^{-1}F(x_i), \quad (1.8)$$

kde  $x_0$  je nějaká vhodně zvolená počáteční aproximace. Často není zřejmé, jak volit toto počáteční přiblížení dostatečně přesně.

Definujme zobrazení  $H : \mathbf{R}^{n+1} \rightarrow \mathbf{R}^n$  takové, že

$$H(x, 1) = G(x), \quad (1.9)$$

$$H(x, 0) = F(x), \quad (1.10)$$

kde  $G : \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^n$  je hladké zobrazení, u kterého známě jeho nulové body. Je-li tedy  $x_0$  nulovým bodem  $G$ , leží za předpokladu splnění podmínek věty o implicitních funkcích (více viz kapitola 2) bod  $(x_0, 1)$  na křivce  $c(s) \in H^{-1}(0)$ . Použitím metody numerické kontinuity se nám může povést najít bod  $(\bar{x}, 0)$  na téže křivce. Bod  $\bar{x}$  je tedy nulovým bodem zobrazení  $F$ .

Můžeme volit například

$$H(x, \lambda) := \lambda G(x) + (1 - \lambda)F(x) \quad \text{nebo,} \quad (1.11)$$

$$H(x, \lambda) := F(x) - \lambda F(x_1). \quad (1.12)$$

# Kapitola 2

## Implicitně zadané křivky

Abychom mohli pokročit k samotnému problému numerické kontinuace, podívejme se pro začátek na některé důsledky plynoucí z věty o implicitních funkcích.

### 2.1 Věta o implicitních funkcích

**Věta 2.1** (O implicitních funkcích). *Nechť  $H : \mathbf{R}^{k+l} \rightarrow \mathbf{R}^l$  je  $\mathcal{C}^p$  zobrazení a na nějakém okolí bodu  $(a, b) \in \mathbf{R}^{k+l}$  splňuje*

1.  $H(a, b) = 0$
2.  $H'(a, b)$  má plnou hodnost  $l$ .

*Pak existuje okolí  $U$  bodu  $a$ , okolí  $V$  bodu  $b$  a  $\mathcal{C}^p$  zobrazení  $F : U \rightarrow V$  tak, že*

1.  $F(a) = b$
2. pro každé  $x \in U$  existuje právě jedno  $y \in V$  takové, že  $y = F(x)$ ,  
 $H(x, y) = 0$ .

Nás bude zajímat zejména případ  $k = 1, l = n$ .

### 2.2 Křivka v $\mathbf{R}^n$

**Definice 2.1** (Křivka v  $\mathbf{R}^n$ ). *Nechť  $I \subseteq \mathbf{R}$  je otevřený interval. Zobrazení  $c : I \rightarrow \mathbf{R}^n$  třídy  $\mathcal{C}^1$  nazveme (parametrizovanou) křivkou v  $\mathbf{R}^n$ . Množinu  $c(I)$  nazveme obrazem křivky.*



My se budeme zabývat pouze regulárními křivkami, tj. takovými, že

$$c'(\alpha) \neq 0 \quad \forall \alpha \in I \quad (2.1)$$

Křivky však mohou být definovány i implicitním vztahem.

**Definice 2.2** (Regulární bod). *Nechť  $F : \mathbf{R}^p \rightarrow \mathbf{R}^q$  je hladké zobrazení. Bod  $x \in \mathbf{R}^p$  je regulárním bodem zobrazení  $F$ , pokud Jacobiho matice  $F'(x)$  má plnou hodnotu. Bod  $y \in \mathbf{R}^q$  nazveme regulární hodnotou zobrazení  $F$ , pokud  $\forall x \in F^{-1}(y)$   $x$  je regulární bod zobrazení  $F$ . Body a hodnoty, které nejsou regulární, nazveme singulární.*

**Definice 2.3** (Implicitně zadaná křivka v  $\mathbf{R}^n$ ). *Nechť  $F : \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^{n-1}$  je  $\mathcal{C}^1$  zobrazení a 0 je jeho regulární hodnota. Řekneme, že  $M \subseteq \mathbf{R}^n$  je implicitně zadaná křivka v  $\mathbf{R}^n$ , pokud ke každému bodu  $x \in M$  existuje jeho okolí  $U$  takové, že  $M \cap U = \{x \in U \mid F(x) = 0\}$ .*

**Lemma 2.2.** *Nechť  $F : \mathbf{R}^p \rightarrow \mathbf{R}^q$  je hladké zobrazení. Množina*

$$\mathcal{R} = \{x \in \mathbf{R}^p \mid x \text{ je regulární bod zobrazení } F\}$$

*je otevřená.*

**Důkaz:** Nechť  $p \geq q$ . Bod  $x \in \mathbf{R}^p$  je regulární, právě když

$$\det(F'(x)F'(x)^T) \neq 0. \quad (2.2)$$

Tvrzení nyní plyne ze spojitosti. Příklad  $p < q$  lze ukázat podobně.  $\square$

**Věta 2.3.** *Nechť  $H : \mathbf{R}^{n+1} \rightarrow \mathbf{R}^n$  je  $\mathcal{C}^1$  zobrazení a existuje bod  $\bar{x} \in \mathbf{R}^{n+1}$  takový, že platí*

$$H(\bar{x}) = 0 \quad (2.3)$$

$$H'(\bar{x}) \text{ má plnou hodnotu } n. \quad (2.4)$$

*Potom existuje interval  $I$  obsahující bod  $\bar{x}_i$  a křivka  $c(\alpha) : I \rightarrow \mathbf{R}^{n+1}$  taková, že*

$$c(\bar{x}_i) = \bar{x} \quad (2.5)$$

$$H(c(\alpha)) = 0 \quad (2.6)$$

$$\text{rank}(H'(c(\alpha))) = n \quad (2.7)$$

$$c'(\alpha) \neq 0 \quad (2.8)$$

**Důkaz:** Za těchto předpokladů existuje index  $i \in \{1, \dots, n+1\}$  takový, že matice vzniklá odstraněním  $i$ -tého sloupce  $H'(\bar{x})$  je regulární. Z věty o implicitních funkcích vyplývá, že rovnice  $H(x) = 0$  definuje na nějakém otevřeném intervalu  $I$   $n$   $\mathcal{C}^1$  funkcí

$$F_1(x_i), \dots, F_{i-1}(x_i), F_{i+1}(x_i), \dots, F_{n+1}(x_i)$$

splňujících

$$\bar{x}_j = F_j(\bar{x}_i), \quad j \neq i \quad (2.9)$$

$$H(F_1(x_i), \dots, F_{i-1}(x_i), x_i, F_{i+1}(x_i), \dots, F_{n+1}(x_i)) = 0 \quad (2.10)$$

Jinými slovy množinu nulových bodů zobrazení  $H$  můžeme lokálně parametrizovat podle  $i$ -té souřadnice. Definujme

$$c(\alpha) = \begin{pmatrix} F_1(\alpha) \\ \vdots \\ F_{i-1}(\alpha) \\ \alpha \\ F_{i+1}(\alpha) \\ \vdots \\ F_{n+1}(\alpha) \end{pmatrix}.$$

Nyní je již snadné ověřit postupně platnost podmínek 2.5-2.8.  $\square$

Můžeme změnit parametrizaci tak, že interval  $I$  bude obsahovat 0 a bude platit  $c(0) = \bar{x}$ .

## 2.3 Tečný vektor a orientace křivky

**Definice 2.4** (tečný vektor). *Nechť  $H : \mathbf{R}^{n+1} \rightarrow \mathbf{R}^n$  je  $\mathcal{C}^1$  zobrazení a existuje bod  $\bar{x} \in \mathbf{R}^{n+1}$  takový, že platí 2.3 a 2.4. Vektor  $t \in \mathbf{R}^{n+1}$  nazveme tečným vektorem ke křivce implicitně zadané rovnicí  $H(x) = 0$  v bodě  $\bar{x}$ , pokud*

$$H'(\bar{x})t = 0 \quad (2.11)$$

$$\|t\| = 1 \quad (2.12)$$

Derivováním vztahu (2.6) dostáváme

$$H'(c(\alpha))c'(\alpha) = 0,$$

tj.  $c'(\alpha)$  je kolmý na řádky matice  $H'(c(\alpha))$  a generuje její jednodimenzionální jádro  $\ker(H'(c(\alpha)))$ . Pro zjednodušení našich úvah změníme parametrizaci tak, aby křivka byla parametrizována obloukem, tj. aby

$$\|c'(s)\| = 1, s \in J.$$

Taková změna parametru existuje pro každou regulární křivku. Vektor  $c'(s)$  je v tomto případě tečným vektorem v bodě  $c(s)$ .

Jádro Jacobiho matice  $H'(c(s))$  obsahuje právě dva vektory normy jedna odpovídající dvěma směrům probíhání křivky. Budeme nyní říkat, že křivka je kladně orientována, pokud determinant

$$\det \begin{pmatrix} H'(c(s)) \\ c'(s)^T \end{pmatrix} > 0, s \in J. \quad (2.13)$$

Tato matice typu  $(n+1) \times (n+1)$  se nazývá rozšířená Jacobiho matice. Je regulární pro všechna  $s \in J$ , a tedy její determinant nemění na  $J$  znaménko. Zvolení pevné orientace nám zaručí, že budeme křivku probíhat stejným směrem.

Podmínky 2.11, 2.12 a 2.13 definují jednoznačně určený kladně orientovaný tečný vektor  $c'(s)$ .

**Definice 2.5.** *Nechť  $A$  je matice typu  $n \times (n+1)$ , která má plnou hodnost, potom jednoznačně určený vektor  $t(A) \in \mathbf{R}^{n+1}$  splňující*

$$At = 0 \quad (2.14)$$

$$\|t\| = 1 \quad (2.15)$$

$$\det \begin{pmatrix} A \\ t^T \end{pmatrix} > 0 \quad (2.16)$$

*nazveme tečným vektorem indukovaným  $A$ .*

**Lemma 2.4.** *Nechť  $M$  je množina všech matic typu  $n \times (n+1)$ , které mají plnou hodnost. Pak  $M$  je otevřená podmnožina  $\mathbf{R}^{n \times (n+1)}$  a zobrazení  $t : A \mapsto t(A)$  je hladké.*

**Důkaz:** Matice  $A \in \mathbf{R}^{n \times (n+1)}$  má plnou hodnost, právě když

$$\det(AA^T) \neq 0. \quad (2.17)$$

První část tvrzení tedy plyne ze spojitosti determinantu. Uvažujme nyní soustavu

$$\begin{pmatrix} At \\ \frac{1}{2}t^T t - \frac{1}{2} \end{pmatrix} = 0. \quad (2.18)$$

Pak vektor  $t(A)$  splňuje tuto soustavu a derivujeme-li levou stranu podle  $t$ , dostaneme matici

$$\begin{pmatrix} A \\ t^T \end{pmatrix},$$

kteřá je čtvercová a pro  $A \in M$  a  $t = t(A)$  má kladný determinant. Druhá část je tedy důsledkem věty o implicitních funkcích.  $\square$

Tečný vektor  $c'(s)$  je tečným vektorem indukovaným Jacobiho maticí  $H'(c(s))$ . Křivka  $c(s)$  je tedy lokálně určena Cauchyho úlohou

$$\dot{u} = t(H'(u)); \quad (2.19)$$

$$u(0) = x_0, \quad (2.20)$$

kde  $x_0 = \bar{x}$  je regulární a splňuje  $H(x_0) = 0$ . Z lemmatu 2.2 a 2.4 vidíme, že pravá strana rovnice je hladké vektorové pole definované na otevřené množině regulárních bodů zobrazení  $H$ .

**Lemma 2.5.** *Zobrazení  $H$  je konstantní podél řešení  $u(s)$  Cauchyho úlohy 2.19 - 2.20, tj.  $H(u(s)) = H(x_0) = \text{const}$ . Speciálně je-li  $H(x_0) = 0$ , pak  $H(u(s)) = 0 \quad \forall s \in I$ .*

**Důkaz:** Derivováním dostaneme

$$\frac{d}{ds}H(u(s)) = H'(u(s))u'(s) = H'(u(s))t(H'(u(s))) = 0.$$

Platí tedy

$$H(u(s)) = \text{const} = H(u(0)) = H(x_0)$$

$\square$

## 2.4 Limitní a bifurkační body

Lemma 2.3 nám říká, že rovnice  $H(x) = 0$  nám na okolí každého regulárního bodu splňujícího tuto rovnici lokálně definuje  $\mathcal{C}^1$  křivku  $c(s) \in H^{-1}(0)$ . Maximální souvislé části množiny  $H^{-1}(0)$  nazveme větvemi.

**Definice 2.6** (bifurkační bod). *Řekneme, že bod  $x_0 \in H^{-1}(0)$  je bodem bifurkace, pokud  $\text{rank}(H'(x_0)) < n$ .*

V bifurkačním bodě není jednoznačně určena větev řešení. V takovém případě není splněna podmínka z definice 2.3, v praxi se však s takovými případy budeme setkávat.

**Definice 2.7** (limitní bod). *Řekneme, že bod  $(x_0, \lambda_0) \in H^{-1}(0)$  je limitním bodem, pokud  $H'(x_0)$  má plnou hodnotu, ale  $H_x(x_0)$  je singulární.*

V tomto případě není možné parametrizovat implicitně zadanou křivku vzhledem k  $\lambda$ . Protože ale  $H'(x_0)$  má plnou hodnotu, je možné parametrizovat křivku podle některé z proměnných  $x_i, i \in \{1, \dots, n\}$ .

# Kapitola 3

## Kontinuace křivek

### 3.1 Metody typu prediktor-korektor

Pokusíme se nyní sestavit jednoduchou metodu typu prediktor-korektor. Máme k dispozici regulární bod  $x_0 \in \mathbf{R}^{n+1}$  takový, že  $H(x_0) = 0$ . Z lemmatu 2.3 víme, že zobrazení  $H$  lokálně definuje křivku  $c(s) \in H^{-1}(0) \subset \mathbf{R}^{n+1}$ . Budeme konstruovat posloupnost bodů

$$x_i, \quad i = 1, 2, \dots$$

aproximujících tuto křivku, které splňují  $\|H(x_i)\| < \varepsilon$  pro  $\varepsilon > 0$  dostatečně malé. Předpokládejme, že jsme již našli bod  $x_i$  splňující příslušné konvergenční kritérium a bod  $x_i$  je regulární. Dále mějme tečný vektor  $t_i = t(H'(x_i))$ . Můžeme tedy aplikovat naše úvahy z předchozí kapitoly a řešit soustavu diferenciálních rovnic s počáteční podmínkou

$$\dot{u} = t(H'(u)); \tag{3.1}$$

$$u(0) = x_i. \tag{3.2}$$

Pro podobné úlohy jsou používány metody typu prediktor-korektor. Nejjednodušším prediktorem je tzv. klasický prediktor

$$\tilde{x}_{i+1} = x_i + h e_{n+1}. \tag{3.3}$$

Lepším prediktorem je Eulerův prediktor ve směru tečny:

$$\tilde{x}_{i+1} = x_i + h t_i, \tag{3.4}$$

kde  $h > 0$  je délka kroku metody. Jak volit optimální délku kroku zmíníme později. Protože pro řešení máme poměrně silnou podmínku  $H(u) = 0$ , i poměrně špatný prediktor může vést k dobré konvergenci. Nyní přistoupíme ke korekčnímu kroku, při kterém hledáme aproximaci bodu  $x_{i+1}$ ,  $H(x_{i+1}) = 0$ . K řešení této úlohy můžeme použít metodu Newtonova typu s počátečním přiblížením  $X^0 := \tilde{x}_{i+1}$  a iterovat, dokud nezískáme bod  $x_{i+1}$ , splňující  $H(x_{i+1}) < \varepsilon$ , který bude novým bodem aproximujícím křivku  $c(s)$ . Protože ale matice  $H'(x)$  není čtvercová, nelze použít standardní vzorec

$$X^{k+1} = X^k - (F'(X^k))^{-1}F'(X^k) \quad (3.5)$$

a musíme přidat další podmínku  $g(x) = 0$ . Dohromady tedy řešíme soustavu

$$H'(x) = 0 \quad (3.6)$$

$$g(x) = 0. \quad (3.7)$$

Otázkou je, jakou lze volit dodatečnou podmínku.

## 3.2 Pseudoarclength kontinuuace

Jednou z možností je hledat nový bod  $X^{k+1}$  v nadrovině kolmé na tečný vektor. Volíme tedy

$$g(x) = \langle x - X^0, t_i \rangle. \quad (3.8)$$

Zapišeme navíc vzorec 3.5 pro Newtonovu metodu v jiném tvaru

$$F'(X^k)(X^{k+1} - X^k) = -F(X^k), \quad (3.9)$$

kde

$$F(X) = \begin{pmatrix} H(X) \\ \langle X^k - X^0, t_i \rangle \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

$$F'(X) = \begin{pmatrix} H'(X) \\ t_i^T \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

Označíme-li  $\delta = X^{k+1} - X^k$  a předpokládáme-li, že  $X^k$  splňuje  $\langle X^k - X^0, t_i \rangle = 0$ , získáme soustavu  $n + 1$  rovnic o  $n + 1$  neznámých

$$\begin{pmatrix} H'(X^k) \\ t_i^T \end{pmatrix} \delta = - \begin{pmatrix} H(X^k) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

Její maticí je rozšířená Jacobiho matice, která je jistě regulární (viz kapitola 2.3). Po jejím vyřešení stačí zvolit  $X^{k+1} := X^k + \delta$ . Korekční krok provádíme, dokud není splněno konvergenční kritérium

$$\|H(X^{k+1})\| < \varepsilon_1 \quad (3.13)$$

$$\|X^{k+1} - X^k\| < \varepsilon_2 \quad (3.14)$$

V tom případě volíme  $x_{i+1} := X^{k+1}$ . V případě, že metoda nezkonverguje po nějakém předem zvoleném počtu kroků, je třeba snížit délku kroku a vrátit se o krok zpět. Nyní zbývá určit nový tečný vektor  $t_{i+1} = t(H'(x_{i+1}))$ . Ten musí být jednak kolmý na řádky matice  $H'(x_{i+1})$ , jednak musí zachovávat orientaci. Řešíme tedy opět soustavu  $n + 1$  rovnic o  $n + 1$  neznámých

$$\begin{pmatrix} H(x_{i+1}) \\ t_i^T \end{pmatrix} t_{i+1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.15)$$

Abychom vyhověli i třetí podmínce, musíme ještě vektor znormalizovat

$$t_{i+1} := \frac{t_{i+1}}{\|t_{i+1}\|}. \quad (3.16)$$

Další možností je korekce v nadrovině určené jednou ze souřadnic  $x_j, j \in \{1, \dots, n\}$ . Dodatečné podmínka pak má tvar

$$\langle x - X^0, e_j \rangle = 0. \quad (3.17)$$

Řešená rovnice pak vypadá takto:

$$\begin{pmatrix} H'(X^k) \\ e_j^T \end{pmatrix} \delta = - \begin{pmatrix} H(X^k) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.18)$$

Matice na levé straně je regulární, právě když  $j$ -tá složka tečného vektoru  $t_j$  je nenulová. Pro zlepšení stability tedy volíme takové  $j$ , že  $\frac{t_{ij}}{\|t_i\|}$  je maximální.

### 3.3 Moore-Penroseova kontinuuace

Moore-Penroseova kontinuuace volí jako korektor bod na křivce nejbližší k predikovanému bodu  $X^0$  :

$$x_{i+1} := \min_{H(x)=0} \|x - X^0\|. \quad (3.19)$$



Nejbližší bod se vždy nachází ve směru kolmém na křivku. Dodatečná podmínka  $g(x) = 0$  má tedy nyní tvar

$$t(H'(x))^T(x - X^0) = 0. \quad (3.20)$$

Podívejme se nyní na to, jak modifikovat Newtonovu metodu pro řešení našeho problému pomocí Moore-Penroseovy pseudoinverze.

**Definice 3.1** (Moore-Penroseova pseudoinverze). *Nechť  $A$  je matice typu  $n \times (n + 1)$  která má plnou hodnost  $n$ . Definujeme Moore-Penroseovu pseudoinverzi matice  $A$  jako  $A^+ = A^T(AA^T)^{-1}$ .*

**Věta 3.1.** *Nechť  $A$  je matice typu  $n \times (n + 1)$  která má plnou hodnost  $n$ ,  $t(A)$  je tečný vektor generovaný  $A$  a  $b \in \mathbf{R}^n$ ,  $x \in \mathbf{R}^{n+1}$  jsou libovolné vektory. Pak následující tvrzení jsou ekvivalentní:*

1.  $Ax = b$  a  $t(A)^T x = 0$ ;
2.  $x = A^+b$ ;
3.  $x$  je řešení úlohy  $\min_{y \in \mathbf{R}^{n+1}} \{\|y\| \mid Ay = b\}$ .

**Důkaz:** Tvrzení (1) je možné zapsat také jako

$$\begin{pmatrix} A \\ t(A)^T \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.21)$$

Dosadíme-li do soustavy 3.21  $x = A^+b$ , dostáváme

$$\begin{pmatrix} A \\ t(A)^T \end{pmatrix} A^+b = \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.22)$$

protože  $AA^+ = I$  z definice Moore-Penroseovy pseudoinverze a

$$0 = (At(A))^T = t(A)^T A^T.$$

$A^+b$  je tedy řešením soustavy 3.21. Protože navíc matice na levé straně je regulární, je toto řešení jednoznačné, čímž jsme ukázali (1)  $\Leftrightarrow$  (2).

Označme nyní  $x = A^+b$ . Obecné řešení rovnice  $Aw = b$  je možné zapsat ve tvaru  $w = x + \alpha t(A)$ , protože  $\ker A = \text{span}(t(A))$ . Protože ovšem podle (1) je  $t(A)^T x = 0$ , musí platit  $\|w\|^2 = \|x\|^2 + \alpha^2$ , a tedy zřejmě  $w$  nabývá minimální normy pro  $\alpha = 0$ .  $\square$

Předchozí věta nám mimo jiné říká, že je-li  $F$  afinní zobrazení, tj.

$$F(x) = Ax - b,$$

pak  $x = A^+b$  je řešením úlohy  $F(x) = 0$  ve smyslu nejmenších čtverců a je kolmé na  $t(A)$ .

Aplikujeme nyní naše úvahy na naše zobrazení  $H$ , které je obecně nelineární. Standardním způsobem podle Taylorova rozvoje aproximujeme  $H$  a tečný vektor  $t(H'(x))$ :

$$H(x) = H(X^0) + H'(X^0)(x - X^0) + O(\|x - X^0\|^2) \quad (3.23)$$

$$t(H'(x))^T(x - X^0) = t(H'(X^0))^T(x - X^0) + O(\|x - X^0\|^2) \quad (3.24)$$

Členy druhého a vyšších řádů zanedbáme a podmínka 3.20 nám dává soustavu

$$H'(X^0)(x - X^0) = -H(X^0) \quad (3.25)$$

$$t(H'(X^0))^T(x - X^0) = 0. \quad (3.26)$$

Označíme ještě  $\delta := X^1 - X^0$  a zapíšeme soustavu maticově:

$$\begin{pmatrix} H'(X^0) \\ t(H'(X^0))^T \end{pmatrix} \delta = - \begin{pmatrix} H(X^0) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.27)$$

Nyní již máme situaci připravenou pro aplikaci věty 3.1. Řešení  $\delta$  soustavy 3.27 mající minimální normu je právě  $-(H'(X^0))^+H(X^0)$ . Klademe proto

$$X^1 := X^0 - (H'(X^0))^+H(X^0) \quad (3.28)$$

$\vdots$

$$X^{k+1} := X^k - (H'(X^k))^+H(X^k). \quad (3.29)$$

Je vidět, že krok modifikované Newtonovy metody se od klasické liší pouze tím, že místo klasické inverze je použita Moore-Penroseova pseudoinverze. Ukážeme si, jak je možné vyhnout se počítání pseudoinverze v každém iteračním kroku. Podívejme se ještě jednou na soustavu 3.27. Protože tečný vektor v bodě  $X^0$  není znám, aproximujeme ho vektorem  $V^0 := t_i$ , tj. tečným vektorem v předchozím bodě na křivce. Obecně v  $k$ -tém kroku použijeme tečný vektor z předchozího kroku, tj.  $V^{k+1} := t(H'(X^k))$ . Geometricky to znamená, že se budeme v každé iteraci pohybovat v nadrovině kolmé

k předchozímu tečnému vektoru. Dodatečná podmínka se bude v každém kroku měnit a bude mít tvar

$$g_k = \langle x - X^k, V^k \rangle. \quad (3.30)$$

Rovnice, kterou budeme řešit v  $k$ -tém kroku bude mít tvar

$$\begin{pmatrix} H'(X^k) \\ (V^k)^T \end{pmatrix} \delta_k = - \begin{pmatrix} H(X^k) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.31)$$

Zbývá určit nový tečný vektor  $V^{k+1}$ . Již jsme naznačili, že ho budeme aproximovat tečným vektorem v předchozím bodě  $X^k$ . Tedy musí splňovat soustavu

$$H'(X^k)V^{k+1} = 0 \quad (3.32)$$

$$(V^k)^T V^{k+1} = 1 \quad (3.33)$$

Výsledný vektor musíme ještě znormalizovat.

Při použití této metody nemusíme po nalezení nového bodu  $x_{i+1}$  aproximujícího křivku hledat jeho tečný vektor  $t(H'(x_{i+1}))$ , neboť stačí použít vektor  $V^k$  z poslední iterace.

### 3.4 Použití QR rozkladu

Podívejme se nyní, jak je možné použít poznatky z numerické lineární algebry na získání tečného vektoru  $t(H'(x))$  a výpočet  $w = A^+b$ , kde  $A$  je matice typu  $n \times (n + 1)$ , která má plnou hodnost, který využijeme v korekčním kroku Moore-Penroseovy kontinuity (viz 3.28). Je možné využít QR-rozklad tak, jak bude popsáno v tomto textu, anebo LU-rozklad, kde  $L$  je dolní trojúhelníková matice a  $U$  horní trojúhelníková matice s jedničkami na diagonále (více viz [1], str. 35-36).

**Definice 3.2** (QR-rozklad, matice typu  $n \times (n + 1)$ ). *Nechť  $A \in \mathbf{R}^{n \times (n+1)}$  má plnou hodnost  $n$ . Pak rozklad*

$$A^T = Q \begin{pmatrix} R \\ 0^T \end{pmatrix}, \quad (3.34)$$

*kde  $Q$  je ortogonální matice typu  $(n + 1) \times (n + 1)$  a  $R$  je regulární horní trojúhelníková matice typu  $n \times n$  nazveme QR-rozkladem matice  $A$ .*

Pro matice tohoto typu existuje QR-rozklad vždy a je možné ho získat např. pomocí Householderových odrazů nebo Givensových rotací (více v [5]).

Jak jednoduše získat tečný vektor  $t(A)$  matice  $A$ , máme-li k dispozici její QR-rozklad? Necht'  $z$  je poslední sloupec matice  $Q$  z QR-rozkladu. Pak

$$Az = \begin{pmatrix} R^T & 0 \end{pmatrix} Q^T z = \begin{pmatrix} R^T & 0 \end{pmatrix} e_{n+1} = 0,$$

$$\|z\| = z^T z = 1,$$

a tedy máme tečný vektor určený až na znaménko. Znaménko zvolíme tak, aby byla splněna kladná orientace. Protože

$$\begin{pmatrix} A^T & z \end{pmatrix} = Q \begin{pmatrix} R & 0 \\ 0^T & 1 \end{pmatrix}$$

$$\det \begin{pmatrix} A \\ z^T \end{pmatrix} = \det \begin{pmatrix} A^T & z \end{pmatrix} = \det Q \det R.$$

Determinant matice  $R$  zjistíme snadno vynásobením prvků na diagonále, determinant matice  $Q$  závisí na metodě použité k získání QR-rozkladu. Např. při použití Givensových rotací je roven 1, při použití Householderových odrazů je roven  $(-1)^p$ , kde  $p$  je počet použitých odrazů.

Podívejme se nyní na problém použití Moore-Penroseovy pseudoinverze při korekčním kroku za předpokladu, že je k dispozici QR-rozklad. Máme

$$\begin{aligned} A^+ &= A^T(AA^T)^{-1} = Q \begin{pmatrix} R \\ 0^T \end{pmatrix} (R^T R)^{-1} = Q \begin{pmatrix} R \\ 0^T \end{pmatrix} R^{-1} (R^T)^{-1} \\ &= Q \begin{pmatrix} (R^T)^{-1} \\ 0^T \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

V každém kroku Newtonovy metody počítáme  $w = A^+ b$ . Nebudeme samozřejmě počítat inverzi  $R^{-1}$ , ale vyřešíme soustavu  $Rx = b$ , což je soustava s trojúhelníkovou maticí, a vynásobíme

$$w = Q \begin{pmatrix} y \\ 0 \end{pmatrix}.$$

### 3.5 Adaptivní volba délky kroku

Správná volba délky kroku významně ovlivňuje efektivitu používaného algoritmu. Zvolíme-li délku kroku zbytečně malou, prodlouží se tím délka výpočtu. Příliš dlouhý krok zase může vést k přeskočení některých významných bodů na křivce, ztrátě konvergence nebo v horším případě i konvergenci k bodu na jiné větvi. Je proto vhodné délku kroku optimalizovat po každém kroku metody.

Jednou z možností, jak zajistit užitečnější délku kroku, je jednoduchá metoda závislá na počtu iterací Newtonovy metody, potřebných v předchozím kroku. Zvolíme konstanty  $h_{inc} > 1$ ,  $h_{dec} < 1$ ,  $n_{max}$  a  $n_{thr}$  a po  $i$ -tém kroku s délkou kroku  $x_i$  a počtem iterací  $n$  položíme novou délku kroku  $h_{i+1}$  takto

$$h_{i+1} := \begin{cases} h_i * h_{dec}, & \text{pokud } n > n_{max}, \text{ tj. metoda nekonverguje;} \\ h_i * h_{inc}, & \text{pokud } n < n_{thr}, \text{ tj. konverguje "ochotně";} \\ h_i, & \text{jinak.} \end{cases} \quad (3.35)$$

Podívejme se nyní na sofistikovanější způsob volby délky kroku. Předpokládejme, že používáme Eulerův prediktor, který je řádu konvergence 2 (viz dále) a porovnáme ho s jiným řádu 3:

$$\tilde{x}_{k+1} = x_k + ht_k + \frac{1}{2}h^2w_k, \text{ kde } w_k = \frac{t_k - t_{k-1}}{\|x_k - x_{k-1}\|} \quad (3.36)$$

Porovnáním získáme přibližnou velikost chyby  $\frac{1}{2}h^2\|w_k\|$ . Necht'  $\varepsilon$  je zvolené kritérium na absolutní velikost chyby v bodě  $\tilde{x}_{k+1}$ . Potom se jako postačující jeví volba kroku

$$h = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{\|w_k\|}}. \quad (3.37)$$

### 3.6 Věty o konvergenci

Na závěr je třeba se zmínit o přesnosti, s jakou metody zmíněné v této práci křivku aproximují. Podívejme se nejprve na prediktory uvedené v kapitole 3.1.

**Definice 3.3** (řád konvergence). *Necht'*

$$x : [-\varepsilon, \varepsilon] \rightarrow \mathbf{R}^n \quad (3.38)$$

je lokální parametrizace křivky v  $\mathbf{R}^n$ . Řekneme, že prediktor  $\tilde{x}(s)$  je řádu  $p \in \mathbf{N}$ , pokud existují konstanty  $\eta > 0$  a  $0 < s_0 \leq \varepsilon$  takové, že

$$\|x(s) - \tilde{x}(s)\| \leq \eta |s|^p \quad \text{pro } |s| < s_0. \quad (3.39)$$

Jako první jsme uvažovali tzv. klasický prediktor, který má však jenom historický význam, protože má řád konvergence pouze  $p = 1$ .

**Věta 3.2.** *Nechť  $x : [-\varepsilon, \varepsilon] \rightarrow \mathbf{R}^n$  je diferencovatelná křivka. Potom klasický prediktor  $\tilde{x}(s) = x(0)$  má řád konvergence 1.*

**Důkaz:** Podle integrální věty o střední hodnotě

$$\|x(s) - x(0)\| = \left\| \int_0^s x'(\xi) d\xi \right\| = \left\| s \int_0^1 x'(\tau s) d\tau \right\| \leq |s| \max_{t \in [-\varepsilon, \varepsilon]} \|x'(t)\|.$$

□

**Věta 3.3.** *Nechť  $x : [-\varepsilon, \varepsilon] \rightarrow \mathbf{R}^n$  je dvakrát diferencovatelná křivka. Potom Eulerův prediktor  $\tilde{x}(s) = x(0) + sx'(0)$  má řád konvergence 2.*

**Důkaz:** Podobně jako v důkazu Věty 3.2 použijeme dvakrát integrální větu o střední hodnotě. Získáme odhad

$$\|x(s) - \tilde{x}(s)\| \leq \frac{1}{2} |s|^2 \max_{t \in [-\varepsilon, \varepsilon]} \|x''(t)\|.$$

□

Nyní se budeme věnovat konvergenčním vlastnostem Newtonovy metody založené na aplikaci Moore-Penroseovy pseudoinverze získané pomocí QR-rozkladu. Důkazy následujících tvrzení přesahují rozsahem možnosti tohoto textu, a proto je v této práci uvedeme pouze bez důkazu. Ty je možné nalézt v ([1], kapitola 5).

**Definice 3.4.** *Nechť  $v \in \mathbf{R}^n$  je regulární bod zobrazení  $H$ . Označme jako*

$$\mathcal{N}(v) = v - H'(v)^+ H(v) \quad (3.40)$$

*zobrazení používané v korekčním kroku. Toto zobrazení se někdy nazývá Newtonovo zobrazení. Označme*

$$\mathcal{N}^1(v) = \mathcal{N}(v) \quad (3.41)$$

$$\mathcal{N}^{i+1}(v) = \mathcal{N}(\mathcal{N}^i(v)). \quad (3.42)$$

*Posloupnost  $\mathcal{N}^i(v)_{i=1}^\infty$  nazveme Newtonovou posloupností.*

**Věta 3.4** (řád konvergence Newtonovy metody). *Nechť  $H : \mathbf{R}^{n+1} \rightarrow \mathbf{R}^n$  je hladké zobrazení a  $0$  je jeho regulární hodnota. Potom existuje okolí  $U \supset H^{-1}(0)$  takové, že*

1. *Zobrazení  $\mathcal{S} : v \in U \mapsto \min_{H(x)=0} \|x - v\|$  je dobře definované a hladké.*
2. *Pro každé  $v \in U$  Newtonova posloupnost  $\mathcal{N}^i(v)_{i=1}^\infty$  konverguje k bodu  $\mathcal{N}^\infty(v) \in H^{-1}(0)$ .*
3.  $\|\mathcal{N}(v) - \mathcal{S}(v)\| = O(\|v - \mathcal{S}(v)\|^2)$ ,
4.  $\|\mathcal{N}^\infty(v) - \mathcal{S}(v)\| = O(\|v - \mathcal{S}(v)\|^2)$ ,
5.  $\mathcal{N}(U) \subset U$ .

**Věta 3.5.** *Nechť  $H : \mathbf{R}^{n+1} \rightarrow \mathbf{R}^n$  je hladké zobrazení,  $0$  je jeho regulární hodnota a  $H(u_0) = 0$  pro nějaké  $u_0 \in \mathbf{R}^{n+1}$ . Označme  $c_h(s)$  po částech lineární křivku generovanou algoritmem založeným na Moore-Penroseově kontinuaci s použitím QR-rozkladu a  $c(s)$  příslušnou křivku v  $H^{-1}(0)$  splňující  $c_h(0) = c(0) = u_0$  a parametrizovanou obloukem. Pak pro pevné  $s_0, C, \varepsilon > 0$  existují konstanty  $C_0, \gamma, h_0 > 0$  takové, že*

1.  $\|H(u)\| \leq 2\varepsilon h^2$  pro každý uzel  $u$  křivky  $c_h$ ,
2.  $\|H(c_h(s))\| \leq (3\varepsilon + \frac{1}{2}\gamma)h^2$  pro  $0 < h \leq h_0$ ,
3.  $\|c_h(s) - c(s)\| \leq C_0 h^2$  pro  $0 < h \leq h_0$ ,

pro všechna  $0 \leq s \leq s_0$ .

Poslední tvrzení nám říká, že uvedený algoritmus nám dává kontinuační metodu, pomocí které získáme křivku lišící se od přesného řešení v řádu  $O(h^2)$ .

# Kapitola 4

## Příklady

V druhé části této práce se budeme věnovat aplikacím předchozí teorie na konkrétní příklady. Triviální aplikací je vlastní kontinuace implicitně zadané křivky. Na obrázcích 4.1 a 4.2 je výsledek kontinuace křivek definovaných vztahem  $x^2 + y^2 - 1 = 0$ , resp.  $x^3 + y^3 - 3xy = 0$ , tedy kruhu a Descartsova listu. V části 1.2 jsme se již zabývali jednou možností aplikace, tzv. homotopickými metodami. V této kapitole si ukážeme použití pro hledání stacionárních řešení soustav autonomních obyčejných diferenciálních rovnic s jedním reálným parametrem, tj.

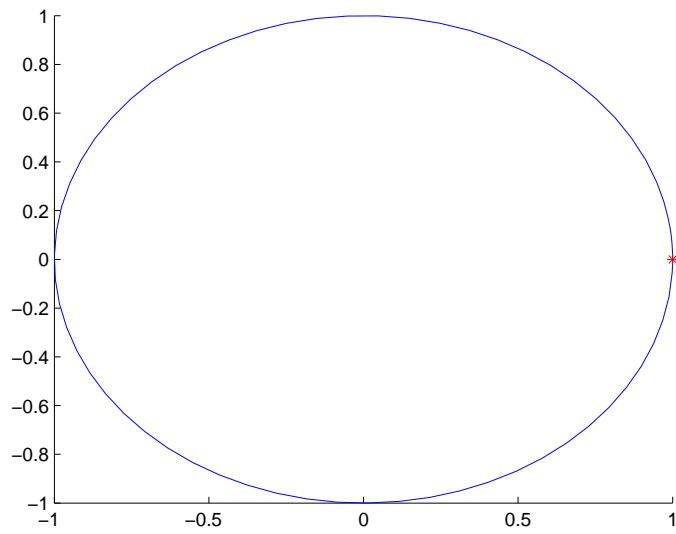
$$\dot{u} = F(u, \lambda) = 0, \lambda \in \mathbf{R}. \quad (4.1)$$

Z předchozí teorie víme, že množina stacionárních řešení tvoří křivku. Pro tyto úlohy byl vyvinut softwarový balík `MATCONT` v prostředí `MATLAB`. Pomocí `MATCONTu` byly zpracovány všechny numerické příklady v této kapitole. `MATCONT` navíc umožňuje kompletní bifurkační analýzu systému, např. detekci singulárních bodů (limitní body, bifurkace).

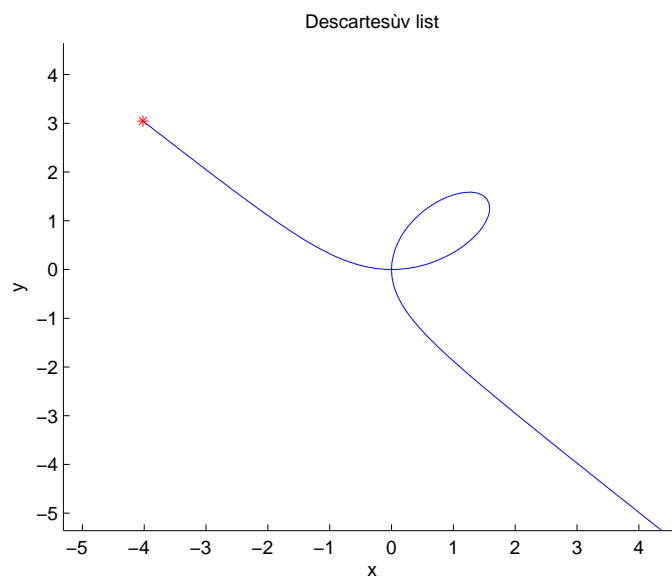
### 4.1 Elastica

Elastica je matematickým modelem borcení axiálně zatíženého nosníku. Tento příklad najdeme např. v ([3], str. 7-11). Jedná se o zjednodušení původního modelu pocházejícího od Eulera. Sestává ze dvou tyčí stejné délky spojených pružinou umožňující vybočení z původního horizontálního směru. Označme jako  $\lambda$  boční tlakovou sílu překonávající odpor pružiny a  $x$  odchylku nosníku od vodorovné osy. Budeme zkoumat velikost odchylky  $x$  v

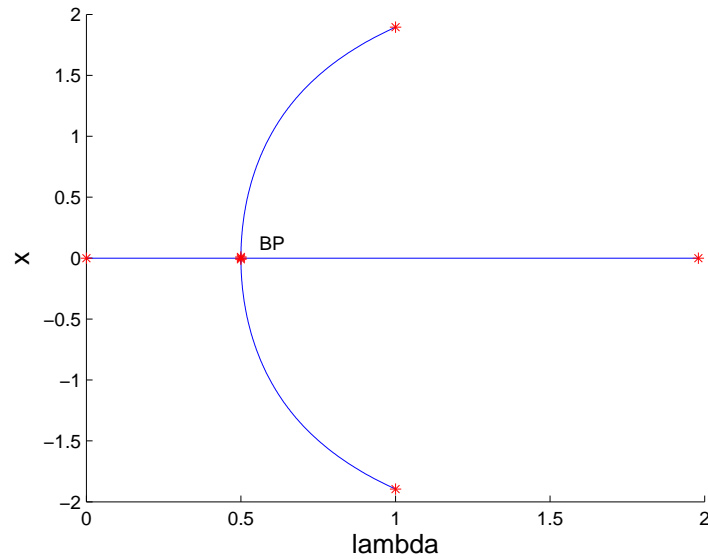




Obrázek 4.1: Výsledek kontinuity křivky  $x^2 + y^2 - 1 = 0$



Obrázek 4.2: Výsledek kontinuity křivky  $x^3 + y^3 - 3xy = 0$



Obrázek 4.3: Elastica: bifurkační diagram

závislosti na působící síle  $\lambda$ . Potenciální energie systému  $V(x, \lambda)$  je v tomto modelu reálná funkce parametru  $\lambda$  daná vzorcem

$$V(x, \lambda) = \frac{1}{2}x^2 - 2\lambda(1 - \cos x). \quad (4.2)$$

Staticky přípustné jsou pro pevnou hodnotu  $\lambda$  pouze ty hodnoty  $x$ , pro které je energie  $V(x, \lambda)$  extrémální. Hodnoty  $x$  a  $\lambda$  tedy musí splňovat rovnici

$$g(x, \lambda) \equiv \frac{\partial}{\partial x}V(x, \lambda) = x - 2\lambda \sin x = 0 \quad (4.3)$$

Množina řešení rovnice 4.3 najdeme pomocí **MATCONT**u aplikací metod numerické kontinuity na křivku definovanou implicitně rovnicí  $g(u) = 0$ . Zřejmě  $g(0, \lambda) = 0$  pro každé  $\lambda \in \mathbf{R}$ , můžeme tedy jako startovací bod použít bod  $(0, 0)$ . **MATCONT** najde řešení  $x = 0$  a indikuje bod bifurkace  $(x, \lambda) = (0, \frac{1}{2})$ . Malými perturbacemi v kladném a záporném směru osy  $x$  v bodě  $\lambda = \frac{1}{2}$  nalezneme zbylé netriviální větve řešení jako na obrázku 4.3. Pro  $\lambda > \frac{1}{2}$  tedy existují tři přípustné stavy.

Nyní do našich úvah zaneseme závislost na čase. Budeme uvažovat dy-

namický model, který je popsán systémem rovnic

$$\dot{u}(t) = F(u(t), \lambda) = \begin{pmatrix} u_2(t) \\ \frac{1}{M}(-g(u_1(t), \lambda) - Cu_2(t)) \end{pmatrix}. \quad (4.4)$$

a počáteční podmínkou

$$u(0) = \begin{pmatrix} u_1^0 \\ u_2^0 \end{pmatrix}, \quad (4.5)$$

kde  $u = [u_1, u_2]$ ,  $u_1 = x$  a  $u_2 = \dot{x}$ , tedy rychlost změny  $x$ -ové souřadnice.  $M$  a  $C$  jsou kladné konstanty, kde  $M$  vyjadřuje setrvačnost hmoty a  $C$  dynamické tření. Řešení úlohy 4.4, 4.5 můžeme vyjádřit jako funkci závislou na čase, počátečních podmínkách a parametru  $\lambda$

$$u(t) = \Phi(t, u^0, \lambda). \quad (4.6)$$

Nás budou zajímat tzv. stacionární řešení (viz 1.4), tj. takové počáteční podmínky, pro které pro pevné  $\lambda$  je řešení  $u(t) = \Phi(t, u^0, \lambda)$  v čase konstantní, tedy musí platit  $\dot{u}(t) = F(u^0, \lambda) = 0$ . Podle 4.4 je to ovšem, právě když

$$u_2 = 0 \quad (4.7)$$

$$g(u_1, \lambda) = 0 \quad (4.8)$$

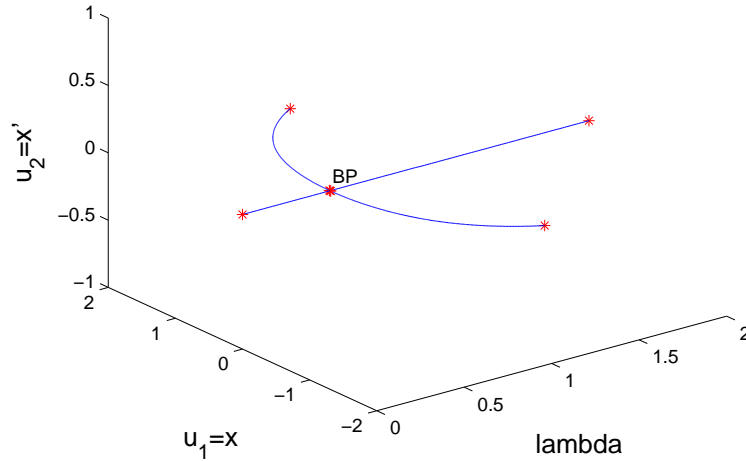
Nikoho tedy asi nepřekvapí množina stacionárních řešení jako výsledek numerické kontinuity na obrázku 4.4. Například pro  $\lambda > \frac{1}{2}$  mám tři různá stacionární řešení. Podíváme-li se, jak se vyvíjí libovolná počáteční podmínka soustavy 4.4, 4.5 v čase, vždy směřuje do jednoho z těchto stabilní stavů. Proto se jim též říká rovnovážný stav (anglicky equilibrium).

Nyní můžeme zpřesnit náš model uvažováním dalších vlivů jako únavy a odporu pružiny. Do rovnice energie je zaneseme jako nové parametry  $\delta$  a  $\varepsilon$ . Parametr  $\varepsilon > 0$  bude modelovat odpor pružiny, zatímco  $\delta$  bude úhel, o který je mechanismus při nulové působící síle vychýlen z ideální vodorovné polohy. Výsledná rovnice energie bude potom vypadat takto:

$$V(x, \lambda, \delta, \varepsilon) = \frac{1}{2}(x - \delta)^2 + 2\lambda(\cos x - 1) + \varepsilon \sin x. \quad (4.9)$$

Přípustná řešení musí opět splňovat

$$g(x, \lambda, \delta, \varepsilon) \equiv \frac{\partial}{\partial x} V(x, \lambda, \delta, \varepsilon) = x - \delta - 2\lambda \sin x + \varepsilon \cos x = 0. \quad (4.10)$$



Obrázek 4.4: Dynamický model Elastica: bifurkační diagram

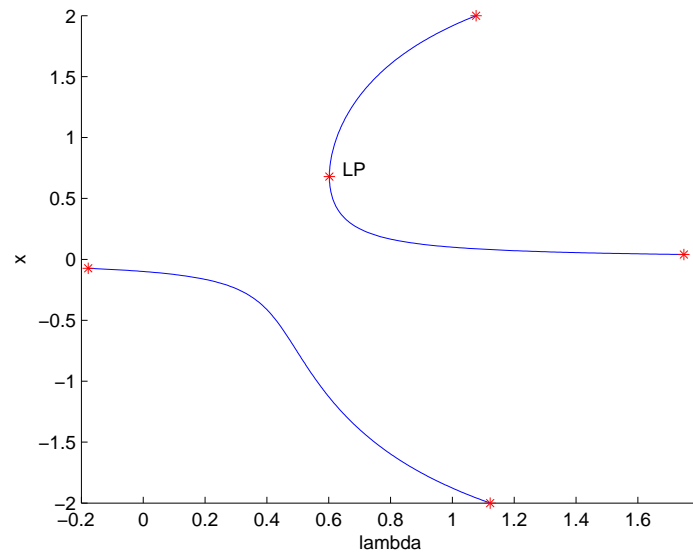
Stacionární řešení jsou určena vztahem

$$\dot{u}(t) = F(u(t), \lambda, \delta, \varepsilon) = 0. \quad (4.11)$$

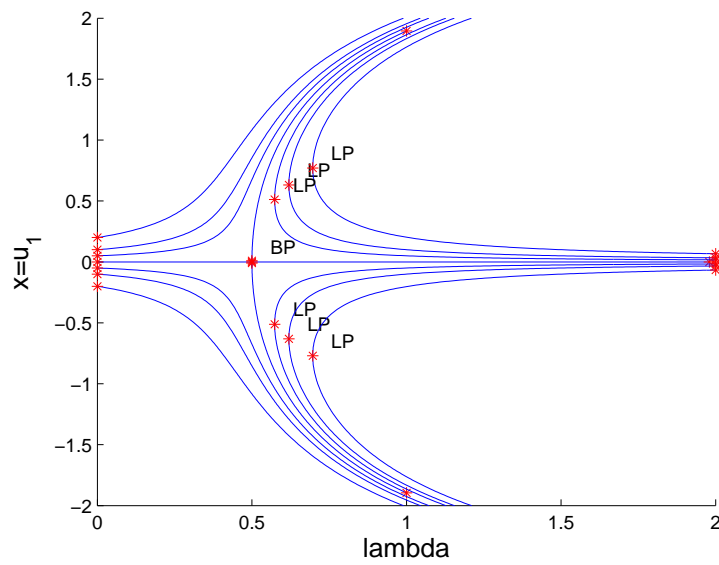
Nejprve se budeme zabývat závislostí na parametru  $\varepsilon$ . Parametr  $\delta$  bude tedy zatím roven 0. Na obrázcích 4.5 a 4.6 je znázorněna množina stacionárních bodů pro  $\varepsilon = 0.1$  a pro několik různě velkých  $\varepsilon$ .

MATCONT vždy našel jeden limitní bod, který je označen jako LP (limit point). Pokud pro každé  $\varepsilon$  najdeme příslušný limitní bod, tyto body tvoří křivku. Protože jeden limitní bod známe, můžeme použít metody numerické kontinuity a získat tuto křivku. Její projekci do množiny parametrů  $\lambda$  a  $\varepsilon$  se říká katastrofická množina. MATCONT nám umožní kontinuovat tuto křivku. Na obrázku 4.7 vidíme, že byl označen bod  $(\lambda, \varepsilon) = (\frac{1}{2}, 0)$  jako CP (cusp point). Jedná se vlastně o původní bod BP z prvního příkladu. Zatímco ostatní limitní body mají kodimenzi 1, tento má kodimenzi 2. Pro hodnoty parametrů  $\lambda$  a  $\varepsilon$  "napravo" od bodu CP má rovnice 4.11 tři reálné kořeny, pro ostatní jeden reálný kořen.

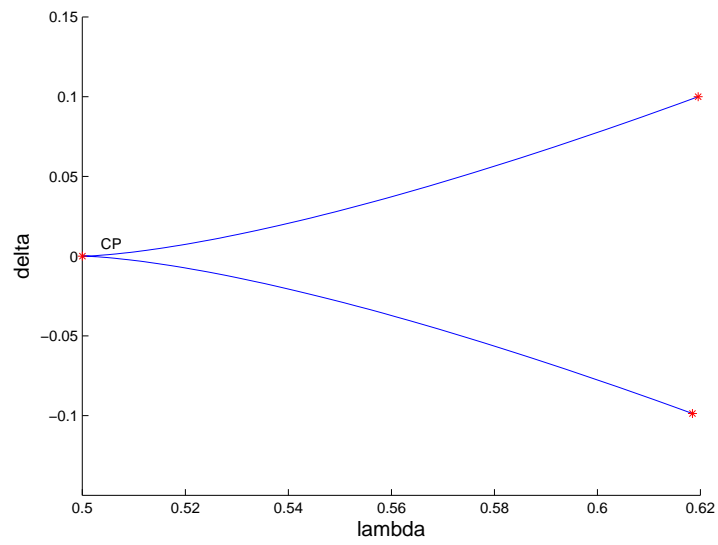
Pro parametr  $\delta$  můžeme aplikovat stejný postup. Pro zajímavost předkládám bifurkační diagram pro  $\delta = 0.1$ ,  $\varepsilon = 0$  na obrázku 4.8



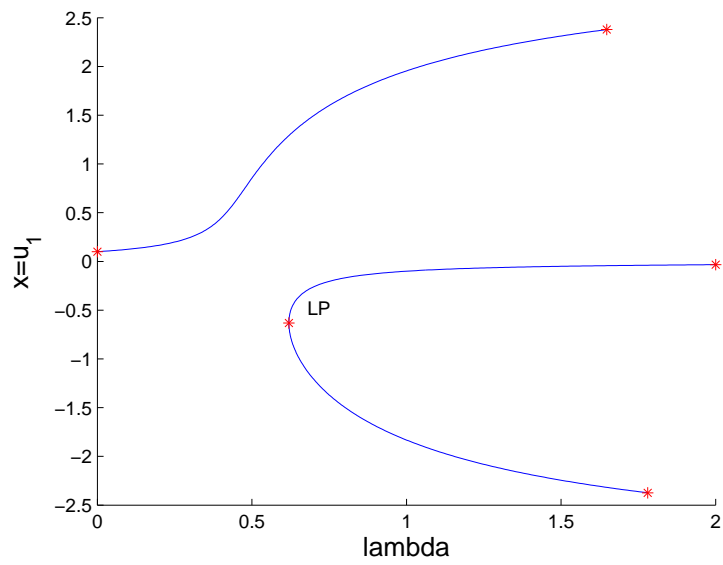
Obrázek 4.5: Elasticita: bifurkační diagram pro  $\varepsilon = 0.1$



Obrázek 4.6: Elasticita: bifurkační diagram pro různá  $\varepsilon$



Obrázek 4.7: Elastica: katastrofická množina



Obrázek 4.8: Elastica: bifurkační diagram pro  $\delta = 0.1$

## 4.2 Eutrofizační model

Druhým příkladem bude model popisující eutrofizaci vod, jehož zadání je možné najít v [4] (kapitola 2, příklad 14). Pojem eutrofizace znamená přirozený proces obohacování vod o živiny, převážně o dusík a fosfor. Mezi hlavní zdroje patří rozklad mrtvých organismů a výplach z půdy. Důsledkem pak bývá přemnožení sinic a bakterií a vznik tzv. vodního květu. To následně způsobuje nedostatek kyslíku u dna vodní plochy, kde dochází k vymírání živých organismů, především ryb.

Tento model popisuje bilanci koncentrace kyslíku a živin ve spodních částech vodních ploch (anglicky hypolimnion). Je určen soustavou obyčejných diferenciálních rovnic

$$\dot{x}_1 = x_1(0.2(\lambda_1 - x_1 - x_2) - 0.445x_3 - 4), \quad (4.12)$$

$$\dot{x}_2 = -0.0455x_2x_3 + 4x_1, \quad (4.13)$$

$$\dot{x}_3 = \lambda_2(10 - x_3) - 2.67x_3(0.445x_1 + 0.0455x_2). \quad (4.14)$$

Proměnná  $x_3$  označuje koncentraci kyslíku,  $x_1$  a  $x_2$  označují množství živin obsažených v biomase, resp. detritu (tj. malé částičky organické hmoty v různém stupni rozkladu tvořící přechod mezi živými a neživými složkami). Model pak závisí na dvou parametrech  $\lambda_1$  a  $\lambda_2$ , kde  $\lambda_1$  značí celkové množství všech živin, včetně těch rozpuštěných ve vodě a  $\lambda_2$  popisuje výměnu kyslíku mezi vodami při hladině (epilimnion) a při dně (hypolimnion).

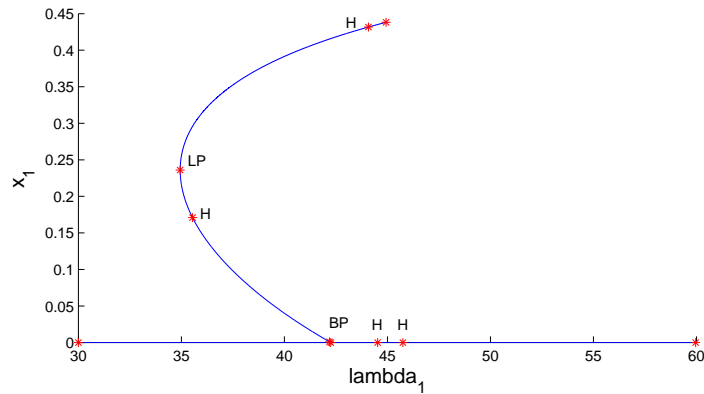
Položíme  $\lambda_2 = 0.7$  a budeme pomocí MATCONTu hledat stacionární řešení soustavy. Z tvaru rovnice je vidět, že každý bod  $(0, 0, 10, \lambda_1)$  můžeme použít jako startovací bod. MATCONT nalezne triviální řešení  $(x_1, x_2, x_3) = (0, 0, 10)$ . Jsou indikovány dva Hopfovy bifurkační body, dále je nalezen singulární bod  $(0, 0, 10, 42.25)$ , který je označen jako bifurkační bod. Z tohoto bodu pak můžeme kontinuovat zbylé větve buď malými perturbacemi ve směru jednotlivých os, nebo zadáním pevného počátečního tečného vektoru různého od  $v_1 = (0, 0, 0, 1)^T$ . Ten je možné zjistit následujícím způsobem. Je vidět, že nadrovina  $x_1 = 0$  obsahuje pouze triviální stacionární řešení. Proto stačí hledat stacionární řešení soustavy

$$x_1 = 0.2(\lambda_1 - x_1 - x_2) - 0.445x_3 - 4, \quad (4.15)$$

$$x_2 = -0.0455x_2x_3 + 4x_1, \quad (4.16)$$

$$x_3 = \lambda_2(10 - x_3) - 2.67x_3(0.445x_1 + 0.0455x_2). \quad (4.17)$$

Její Jacobiho matice má v bodě  $(0, 0, 10, 42.25)$  plnou hodnost a tečný vektor



Obrázek 4.9: Eutrofikace: bifurkační diagram pro proměnnou  $x_1$

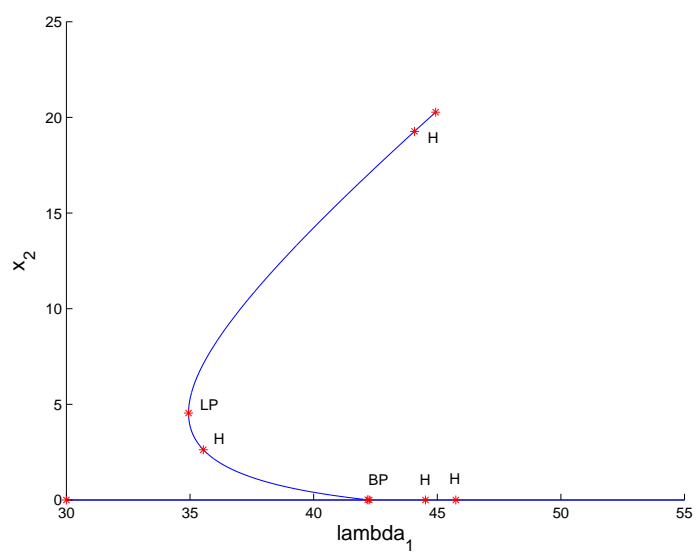
indukovaný touto maticí je (až na násobek skalárem)

$$v_2 = (-0.0161493, -0.141972, 0.520504, 1)^T. \quad (4.18)$$

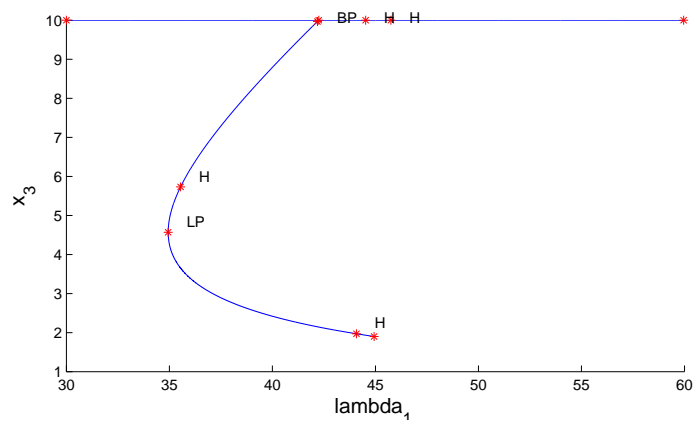
Na obrázcích 4.9, 4.10 a 4.11 je znázorněna projekce řešení do roviny  $(x_1, \lambda_1)$ ,  $(x_2, \lambda_1)$ , resp  $(x_3, \lambda_1)$ . Bylo by pochopitelně možné najít i řešení pro záporná  $x_1$  a  $x_2$  (viz obrázek 4.12, ale ta nemají dobrý fyzikální význam, neboť proměnné  $x_1$  a  $x_2$  označují koncentrace).

Z obrázku vidíme, že na křivce leží limitní bod označený jako LP. Pro hodnoty parametru  $\lambda_1$  napravo od tohoto bodu tedy existuje více rovnovážných stavů. Na obrázku 4.13 vidíme, jak se mění bifurkační diagram pro různé hodnoty dosud pevného parametru  $\lambda_2$ . Podobně jako v prvním příkladě tak můžeme sestavit katastrofickou množinu (obrázek 4.14).

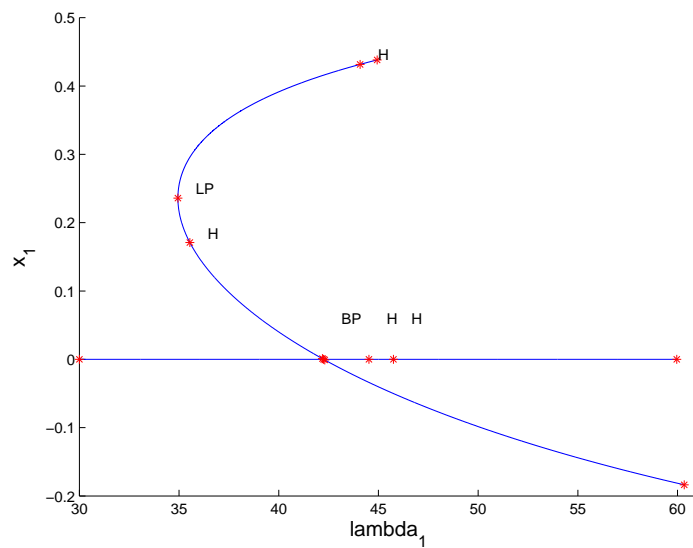




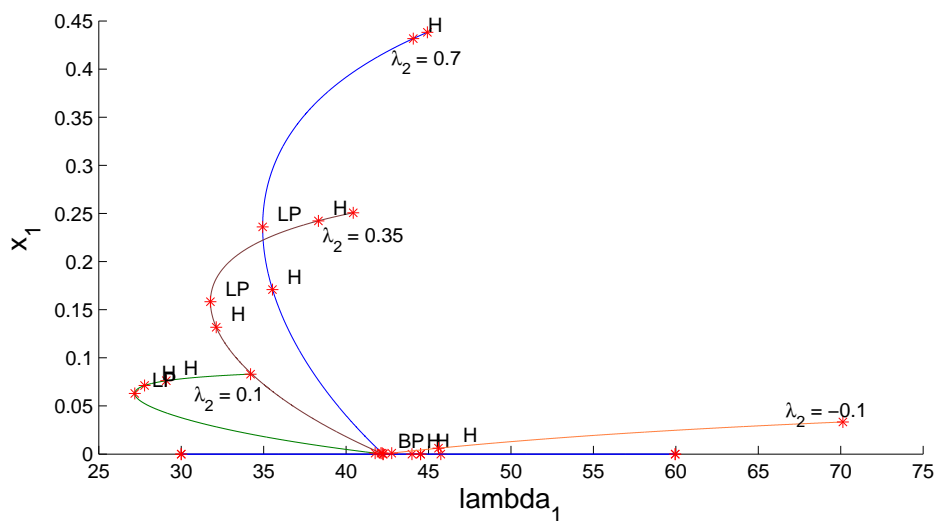
Obrázek 4.10: Eutrofikace: bifurkační diagram pro proměnnou  $x_2$



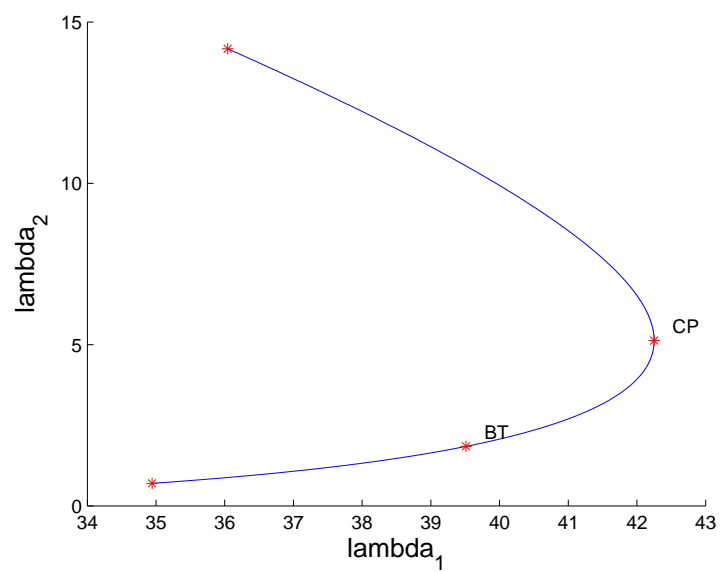
Obrázek 4.11: Eutrofikace: bifurkační diagram pro proměnnou  $x_3$



Obrázek 4.12: Eutrofikace: bifurkační diagram pro proměnnou  $x_1$  včetně záporné větve



Obrázek 4.13: Eutrofikace: bifurkační diagram pro proměnnou  $x_1$  a různé hodnoty parametru  $\lambda_1$



Obrázek 4.14: Eutrofikace: katastrofická množina

# Kapitola 5

## Závěr

Tato práce si kladla za cíl zpracovat oblast numerické matematiky, která bývá často opomíjena a o které je dostupné pouze málo materiálů v českém jazyce. Teorie potom byla ilustrována na dvou praktických příkladech. Jistě by se na toto téma dalo dívat z dalších hledisek, například co se týče lepších metod volby délky kroku. V této práci navíc nebyl vůbec uvažován další způsob kontinuace pomocí tzv. PL-algoritmu (piecewise linear). Přesto věřím, že tato práce poskytne čtenáři základní přehled o principech, které se při kontinuaci křivek používají.

# Literatura

- [1] Eugene L. Allgower, Kurt Georg: *Numerical continuation methods: an introduction*, Springer, Berlin, 1990.
- [2] Peter Deuffhard, Andreas Hohmann: *Numerical analysis in modern scientific computing*, Springer, New York, 2003.
- [3] Martin Golubitsky, David G. Schaeffer: *Singularities and Groups in Bifurcation Theory (Volume 1)*, Springer, New York, 1985.
- [4] Willy J. F. Govaerts: *Numerical methods for bifurcations of dynamical equilibria*, SIAM, Philadelphia, 2000.
- [5] D.S. Watkins : *Fundamentals of Matrix Computations (Second edition)*, J. Wiley & Sons, New York, 2002.