Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Róbert Pathó

Analýza citlivosti při řešení soustav lineárních algebraických rovnic

Katedra numerické matematiky

Vedoucí bakalářské práce: Prof. RNDr. Jaroslav Haslinger, DrSc.
Studijní program: Matematika, obecná matematika

2007

Rád bych poděkoval vedoucímu bakalářské práce, Prof. RNDr. Jaroslavovi Haslingerovi, DrSc. za pravidelné čtení stávajícího se textu, užitečné připomínky a za věnovaný čas vůbec. Vřelý dík dále patří mému bratrovi a rodičům za podporu při psaní práce.

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

V Praze dne 4.8.2007 Róbert Pathó

Obsah

Název práce: Analýza citlivosti při řešení soustav lineárních algebraických rovnic
Autor: Róbert Pathó
Katedra (ústav): Katedra numerické matematiky
Vedoucí bakalářské práce: Prof. RNDr. Jaroslav Haslinger, DrSc.
e-mail vedoucího: `hasling@karlin.mff.cuni.cz`

Abstrakt: V první části práce studujeme řešení soustavy lineárních algebraických rovnic závisející na parametru. Ukážeme, že za jistých předpokladů je řešení spojitě diferencovatelné vzhledem k tomuto parametru a odvodíme vztah pro výpočet její směrové derivaci. Cílem je tyto poznatky aplikovat na úlohu, ve kterém aproximujeme danou funkci v prostoru L^2, resp. $W^{1,2}$ na intervalu (a, b) po částech lineárními funkcemi: snažíme se najít optimální dělení intervalu při pevném počtu dělících uzlů. Numerickými experimenty zjišťujeme vliv dělení intervalu na chybu aproximace a řád konvergence.

Klíčová slova: soustava lineárních rovnic závisející na parametru, ortogonální projekce, po částech lineární aproximace

Title: Sensitivity analysis in systems of linear algebraic equations
Author: Róbert Pathó
Department: Department of Numerical Mathematics
Supervisor: Prof. RNDr. Jaroslav Haslinger, DrSc.
Supervisor's e-mail address: `hasling@karlin.mff.cuni.cz`

Abstract: In the first part of the thesis we show, that under certain conditions, the solution of a system of linear algebraic equations depending on a parameter is a continuously differentiable function of that parameter. We also derive a formula for computing directional derivatives. Our main goal is then to apply these results to the approximation of a given function in L^2, resp. $W^{1,2}$ in (a, b) by piecewise linear functions. Namely, we try to find a partition of the interval (a, b) that is optimal in a particular sense. Numerical experiments show the effect of found partitions on the approximation error and the rate of convergence.

Keywords: system of linear equations depending on a parameter, orthogonal projection, piecewise linear aproximation

Kapitola 1

Analýza citlivosti

Motivace. Každou soustavu n lineárních rovnic s n neznámými lze zapsat ve tvaru:

$$\mathbf{A}x = f,$$

kde $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je matice soustavy a $f \in \mathbb{R}^n$ je vektor pravé strany.
Budeme uvažovat soustavu lineárních algebraických rovnic takovou, ve které matice soustavy a pravá strana závisí na parametru $\alpha \in U$, kde $U \subset \mathbb{R}^d$ je neprázdná, otevřená množina:

$$\mathbf{A}(\alpha) x_\alpha = f(\alpha) \tag{1.1}$$

Symbolem x_α jsme označili řešení soustavy (1.1) příslušné hodnotě parametru α. V dalším se nejdřív budeme věnovat diferencovatelnosti zobrazení $x(\alpha) := x_\alpha$ podle tohoto parametru (zatím nevíme ani to, zda je to dobře definované zobrazení!).

Věta 1.1. *Buď $U \subset \mathbb{R}^d$ neprázdná otevřená množina, dále nechť maticová funkce $\mathbf{A} : U \to \mathbb{R}^{n \times n}$ a vektorová funkce $f : U \to \mathbb{R}^n$ splňují následující podmínky:*

(i) $\forall \alpha \in U : \ \mathbf{A}(\alpha)$ *je regulární;*

(ii) $\mathbf{A} \in C^1(U; \mathbb{R}^{n \times n}), \ f \in C^1(U; \mathbb{R}^n)$.

Potom existuje funkce $x : U \to \mathbb{R}^n$ splňující:

$$\mathbf{A}(\alpha) x(\alpha) = f(\alpha) \quad \forall \alpha \in U, \tag{1.2}$$

která je navíc spojitě diferencovatelná na U vzhledem k parametru α a pro směrovou derivaci $x'(\alpha;\beta)$ v bodě $\alpha \in U$ a směru $\beta \in \mathbb{R}^d$ platí:

$$x'(\alpha;\beta) = \mathbf{A}(\alpha)^{-1}\left(f'(\alpha;\beta) - \mathbf{A}'(\alpha;\beta)x(\alpha)\right), \tag{1.3}$$

kde $\mathbf{A}'(\alpha;\beta)$ a $f'(\alpha;\beta)$ jsou příslušné derivace $\mathbf{A}$ a f v bodě α a směru β.

Důkaz. Není těžké si rozmyslet, že existenci korektně definovaného zobrazení $x : \alpha \mapsto x_\alpha$ (x_α je jako v (1.1)) nám zaručí již vlastnost (i) (stačí položit $x(\alpha) = \mathbf{A}(\alpha)^{-1}f(\alpha)$). Uvidíme však, že věta o implicitních funkcích dává nejenom existenci funkce $x(\alpha)$, ale také její hladkost.
Zvolme $\alpha_0 \in U$ libovolně. Položme $x_0 = x_{\alpha_0}$, tj. řešení soustavy (1.1) pro $\alpha = \alpha_0$ a definujme zobrazení $F : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ vztahem: $F(\alpha, x) = \mathbf{A}(\alpha)x - f(\alpha)$. Potom platí:

- $F(\alpha_0, x_0) = 0$;
- $\det \nabla_x F(\alpha_0, x_0) = \det \mathbf{A}(\alpha_0) \neq 0$, neboť dle předpokladu $\mathbf{A}(\alpha_0)$ je regulární;
- z vlastnosti (ii) a z toho, že $\nabla_x F(\alpha, x) = \mathbf{A}(\alpha)$ vyplývá, že $F \in C^1(U \times \mathbb{R}^n; \mathbb{R}^n)$.

Tím máme ověřené všechny předpoklady věty o implicitních funkcích, tudíž platí: $\exists \mathcal{U}_0 \subset U$ okolí α_0 tak, že rovnice $F(\alpha, x) = 0$, $\alpha \in \mathcal{U}_0$ má právě jedno řešení $x(\alpha)$ a navíc zobrazení $x : \alpha \mapsto x(\alpha)$ je třídy $C^1(\mathcal{U}_0; \mathbb{R}^n)$. Jelikož $\alpha_0 \in U$ bylo zcela libovolné, je $x \in C^1(U; \mathbb{R}^n)$.
K odvození vztahu, který splňuje směrová derivace $x'(\alpha;\beta)$ v bodě α a směru β využijeme definici směrové derivace:

$$\mathbf{A}'(\alpha;\beta) = \lim_{t\to 0+} \frac{\mathbf{A}(\alpha + t\beta) - \mathbf{A}(\alpha)}{t},$$
$$f'(\alpha;\beta) = \lim_{t\to 0+} \frac{f(\alpha + t\beta) - f(\alpha)}{t}.$$

Buď $\beta \in \mathbb{R}^d$ libovolný, $t > 0$ reálné číslo. Potom:

$$\mathbf{A}(\alpha + t\beta)x(\alpha + t\beta) = f(\alpha + t\beta),$$
$$\mathbf{A}(\alpha)x(\alpha) = f(\alpha).$$

Odečtením druhé rovnice od první, rozšířením o člen $\mathbf{A}(\alpha+t\beta)x(\alpha)-\mathbf{A}(\alpha+t\beta)x(\alpha)$ a vydělením číslem t dostaneme rovnost:

$$\mathbf{A}(\alpha+t\beta)\frac{x(\alpha+t\beta)-x(\alpha)}{t}+\frac{\mathbf{A}(\alpha+t\beta)-\mathbf{A}(\alpha)}{t}x(\alpha)=\frac{f(\alpha+t\beta)-f(\alpha)}{t}$$

Nyní stačí provést limitní přechod pro $t\to 0_+$ a ihned obdržíme hledaný vztah pro směrovou derivaci $x'(\alpha;\beta)$:

$$\mathbf{A}(\alpha)x'(\alpha;\beta)=f'(\alpha;\beta)-\mathbf{A}'(\alpha;\beta)x(\alpha), \tag{1.4}$$

neboť $\mathbf{A}$, f a x jsou zobrazení třídy C^1, tudíž příslušné derivace existují. □

Nechť v dalším platí předpoklady předchozí věty. Buď $J: U\times\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ libovolné zobrazení třídy $C^1(U\times\mathbb{R}^n)$ a definujme funkci $\mathcal{J}: U\to\mathbb{R}$ jako:

$$\mathcal{J}(\alpha):=J(\alpha,x(\alpha)),$$

kde $x(\alpha)$ je řešení soustavy (1.2).
V předchozím jsme dokázali, že z platnosti (i) a (ii) je $x\in C^1(U;\mathbb{R}^n)$ a tudíž je také $\mathcal{J}\in C^1(U)$ podle věty o derivaci složeného zobrazení. Zvolíme-li tedy libovolný vektor $\beta\in\mathbb{R}^d$, pak podle výše uvedené věty dostaneme:

$$\mathcal{J}'(\alpha;\beta)=\nabla_\alpha J(\alpha,x(\alpha))^T\beta+\nabla_x J(\alpha,x(\alpha))^T x'(\alpha;\beta). \tag{1.5}$$

Budeme-li chtít počítat $\mathcal{J}'(\alpha;\beta)$ přímo ze vzorce (1.5), musíme pro každý směr $\beta\in\mathbb{R}^d$ navíc vyřešit soustavu (1.4), abychom dostali $x'(\alpha;\beta)$. Tomu se však vyhneme, zavedeme-li pojem tzv. *adjungovaného stavu* a *adjungované soutavy*:

$$\mathbf{A}(\alpha)^T p(\alpha)=\nabla_x J(\alpha,x(\alpha)). \tag{1.6}$$

Transponováním a vynásobením $x'(\alpha;\beta)$ dostaneme:

$$\begin{aligned}\nabla_x J(\alpha,x(\alpha))^T x'(\alpha;\beta)=&p^T(\alpha)\mathbf{A}(\alpha)x'(\alpha;\beta)\\=&p^T(\alpha)\left[f'(\alpha;\beta)-\mathbf{A}'(\alpha;\beta)x(\alpha)\right].\end{aligned}$$

V poslední rovnosti jsme využili vztah (1.4) pro derivaci $x'(\alpha;\beta)$. Stačí jenom dosadit odvozenou rovnost do (1.5), čímž získáme výsledný vztah:

$$\mathcal{J}'(\alpha;\beta)=\nabla_\alpha J(\alpha,x(\alpha))^T\beta+p^T(\alpha)\left[f'(\alpha;\beta)-\mathbf{A}'(\alpha;\beta)x(\alpha)\right]. \tag{1.7}$$

Všimněme si, že adjungovaná soustava (1.6) nezávisí na β, tudíž ji stačí vyřešit pouze jednou, abychom mohli určit směrovou derivaci $\mathcal{J}'(\alpha;\beta)$ pro libovolný směr β!

Poznámka. Jiné odvození vztahu (1.7) založené na metodě Lagrangeových multiplikátorů lze nalézt v knize [1].

Dodatek. Nakonec si ukážeme příklad funkce $\mathcal{J}(\alpha)$, pro kterou nepotřebujeme vyřešit adjungovanou soustavu, abychom spočítali směrovou derivaci $\mathcal{J}'(\alpha;\beta)$ v bodě α a směru β.
Buď $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ *symetrická* matice. Potom platí, že vektor $x \in \mathbb{R}^n$ řeší soustavu $\mathbf{A}x = f$ právě když x minimalizuje jistou funkci $J(y)$. Přesněji:

$$\mathbf{A}x = f \quad \Longleftrightarrow \quad x = \arg\min_{y\in\mathbb{R}^n} J(y),$$
$$J(y) = \frac{1}{2}\langle y, \mathbf{A}y\rangle - \langle y, f\rangle,$$

kde $\langle\cdot\,,\cdot\rangle$ značí standardní skalární součin v $\mathbb{R}^n$ definovaný vztahem

$$\langle x, y\rangle := \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n.$$

Uvažujeme-li soustavu lineárních algebraických rovnic závisející na parametru α, předchozí tvrzení můžeme přeformulovat následovně:

$$\mathbf{A}(\alpha)x(\alpha) = f(\alpha)\ \forall\alpha \in U \quad \Longleftrightarrow \quad x(\alpha) = \arg\min_{y\in\mathbb{R}^n} J(\alpha, y)\ \forall\alpha \in U,$$
$$J(\alpha, y) = \frac{1}{2}\langle y, \mathbf{A}(\alpha)y\rangle - \langle y, f(\alpha)\rangle.$$

Definujme $\mathcal{J}(\alpha)$ takto:

$$\mathcal{J}(\alpha) := J(\alpha, x(\alpha)) = \frac{1}{2}\langle x(\alpha), \mathbf{A}(\alpha)x(\alpha)\rangle - \langle x(\alpha), f(\alpha)\rangle. \tag{1.8}$$

Předpokládejme, že maticová funkce $\mathbf{A}(\alpha)$ a vektorová funkce $f(\alpha)$ splňují podmínky (i) a (ii) z Věty 1.1. Potom je funkce $\mathcal{J}(\alpha)$ spojitě diferencovatelná na množině U, neboť $f \in C^1(U)$, $\mathbf{A} \in C^1(U)$ a $x \in C^1(U)$ díky právě zmíněné věty.

Symetrii matice $\mathbf{A}(\alpha)$ a to, že $x(\alpha)$ splňuje rovnici $\mathbf{A}(\alpha)x(\alpha) = f(\alpha)$

použijeme k odvození směrové derivace $\mathcal{J}'(\alpha;\beta)$:

$$\begin{aligned}
\mathcal{J}'(\alpha;\beta) =& \frac{1}{2}\underbrace{\langle x'(\alpha;\beta), \mathbf{A}(\alpha)x(\alpha)\rangle} + \frac{1}{2}\langle x(\alpha), \mathbf{A}'(\alpha;\beta)x(\alpha)\rangle \\
&+ \frac{1}{2}\underbrace{\langle x(\alpha), \mathbf{A}(\alpha)x'(\alpha;\beta)\rangle} - \langle x'(\alpha;\beta), f(\alpha)\rangle - \langle x(\alpha), f'(\alpha;\beta)\rangle \\
=& \langle x'(\alpha;\beta), \mathbf{A}(\alpha)x(\alpha)\rangle - \langle x'(\alpha;\beta), f(\alpha)\rangle + \frac{1}{2}\langle x(\alpha), \mathbf{A}'(\alpha;\beta)x(\alpha)\rangle \\
&- \langle x(\alpha), f'(\alpha;\beta)\rangle \\
=& \langle x'(\alpha;\beta), \underbrace{\mathbf{A}(\alpha)x(\alpha) - f(\alpha)}_{=0}\rangle + \frac{1}{2}\langle x(\alpha), \mathbf{A}'(\alpha;\beta)x(\alpha)\rangle \\
&- \langle x(\alpha), f'(\alpha;\beta)\rangle \\
=& \frac{1}{2}\langle x(\alpha), \mathbf{A}'(\alpha;\beta)x(\alpha) - 2f'(\alpha;\beta)\rangle.
\end{aligned}$$

Kapitola 2

Projekce v Hilbertových prostorech

Úvod. V celé této kapitole dvojice $(X, (\cdot\,,\cdot))$ bude značit reálný Hilbertův prostor se skalárním součinem $(\cdot\,,\cdot)$. Nechť $L \subset\subset X$ je podprostor X konečné dimenze.
Cílem tohoto úvodu je připomenout, jak k danému prvku $x \in X$ nalézt $g \in L$, který je k němu "nejbližší" v normě prostoru L, tj. $\|x - g\| = \min_{z\in L} \|x - z\|$. K tomu uvedeme bez důkazů dvě věty, známé z funkcionální analýzy. Příslušné důkazy lze nalézt například v [2].

Věta 2.1. *Nechť $(X, (\cdot\,,\cdot))$ je Hilbertův prostor, $L \subset\subset X$ uzavřený podprostor X. Potom:*

$$\forall x \in X\ \exists! g \in L: \quad \|x - g\| = \min_{z\in L} \|x - z\|.$$

Věta 2.2. *Buď $(X, (\cdot\,,\cdot))$ Hilbertův prostor, $L \subset\subset X$ uzavřený podprostor. Nechť $x \in X$ a $g \in L$. Pak*

$$\|x - g\| = \min_{z\in L} \|x - z\| \quad \Longleftrightarrow \quad (x - g, z) = 0, \ \ \forall z \in L.$$

Označme $\{\varphi_1, \dots, \varphi_n\}$ bázi prostoru L, kde $n = \dim L$. Podle Věty 2.2 stačí najít koeficienty $\alpha_1, \dots, \alpha_n \in \mathbb{R}$ tak, že pro $g = \sum_{i=1}^n \alpha_i \varphi_i$ platí:

$$(x - g, z) = 0 \ \ \forall z \in L.$$

Jelikož reálný skalární součin je lineární v druhé složce, stačí nalézt $g \in L$ tak, aby:

$$(x - g, \varphi_j) = 0, \ \ \forall j = 1, \dots, n.$$

Tedy:

$$(x - \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \varphi_i, \varphi_j) = 0, \quad \forall j = 1, \dots, n,$$

což je ekvivalentní:

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i (\varphi_i, \varphi_j) = (x, \varphi_j), \quad \forall j = 1, \dots, n. \tag{2.1}$$

Soustavu (2.1) můžeme zapsat v maticovém tvaru:

$$\mathbf{A}\alpha = F, \tag{2.2}$$

kde $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)^T$ je hledaný vektor koeficientů lineární kombinace, $F = ((x, \varphi_1), \dots, (x, \varphi_n))^T$ je vektor pravé strany a $\mathbf{A} = ((\varphi_i, \varphi_j))_{i,j=1}^n$ je matice soustavy, tzv. *Gramova matice.*

Řešitelnost soustavy (2.2) a tudíž také existenci nejbližšího prvku dokazuje následující lemma.

Lemma 2.3. *Gramova matice* $\mathbf{A} = ((\varphi_i, \varphi_j))_{i,j=1}^n$ *definovaná jako výše je regulární.*

Důkaz. Plyne ihned z lineární nezávislosti bázových vektorů φ_i, $i = 1, \dots, n$. □

Nyní ukážeme, že jsme v podstatě zkonstruovali ortogonální projekci prostoru X na jeho konečně dimenzionální podprostor $L = \text{span}\{\varphi_1, \dots, \varphi_n\}$.

Definujme proto zobrazení $P : X \longrightarrow L$ předpisem $Px = \sum_{i=1}^n \alpha_i \varphi_i \; \forall x \in X$, kde koeficienty α_i jsou řešením soustavy (2.2). Potom operátor P je

- lineární (snadno se ověří z (2.1)),
- $\forall x \in L : \; Px = x \implies P^2 = P$,
- konečně dimenzionální $\implies$ spojitý,
- $\operatorname{Ker} P = \{x \in X : \sum_i \alpha_i \varphi_i = 0\} = \{x \in X : (x, \varphi_i) = 0 \; \forall i\} = L^\perp = (\operatorname{Rng} P)^\perp$.

Tudíž P je skutečně ortogonální projekce X na L.

Úloha 2.4. *Nechť $a, b \in \mathbb{R}$, $a < b$; $n \in \mathbb{N}$. Uvažujme dělení $\Delta_n := \{a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b\}$ intervalu $[a, b]$ a označme L_n prostor všech po částech lineárních, spojitých funkcí na tomto dělení:*

$$L_n := L(\Delta_n) = \left\{\varphi \in C[a, b];\ \ \varphi \restriction_{[x_{i-1}, x_i]} \in P_1\ \ \forall i = 1, \ldots, n\right\},$$

a jeho podprostor:

$$\widetilde{L}_n := \widetilde{L}(\Delta_n) = \{\varphi \in L_n;\ \varphi(a) = 0\}.$$

Pro daný $f \in X_1$, resp. X_2 nalezněme jeho ortogonální projekci na L_n resp. $\widetilde{L}_n$, je-li:

(a) $X_1 = L^2(a, b)$ se skalárním součinem:

$$(f, g) = \int_a^b f(x)g(x)\,dx \quad \forall f, g \in X_1,$$

(b) $X_2 = \{f \in W^{1,2}(a, b);\ f(a) = 0\}$ se skalárním součinem:

$$(f, g) = \int_a^b f'(x)g'(x)\,dx \quad \forall f, g \in X_2,$$

kde $W^{1,2}(a, b)$ je Sobolevův prostor $W^{1,2}$ na intervalu (a, b) a $f' \in L^2(a, b)$ značí slabou derivaci funkce $f \in X_2$.

Poznámka. Na reálné přímce platí, že $W^{1,2}(a, b) \hookrightarrow C([a, b])$ v tom smyslu, že pro každou třídu funkcí $f \in W^{1,2}(a, b)$ existuje její reprezentant $f^\sharp$, který je spojitý na intervalu $[a, b]$ a tudíž má smysl pro něj definovat bodovou hodnotu $f^\sharp(a)$. Prostor X_2 je tedy korektně definován, neboť pro $f \in W^{1,2}(a, b)$ položíme: $f(a) := f^\sharp(a)$.

Lemma 2.5. *(a) L_n je lineární podprostor prostoru X_1, $\dim L = n + 1$. Jeho bázové funkce jsou:*

$$\varphi_0(x) := \begin{cases} \frac{x_1 - x}{x_1 - x_0} & , x \in [x_0, x_1], \\ 0 & jinak \end{cases} \tag{2.3}$$

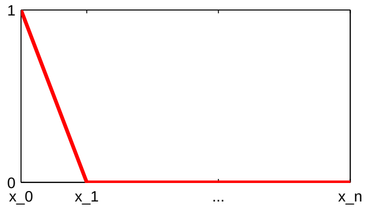
$$\varphi_j(x) := \begin{cases} \frac{x - x_{j-1}}{x_j - x_{j-1}} & , x \in [x_{j-1}, x_j], \\ \frac{x_{j+1} - x}{x_{j+1} - x_j} & , x \in [x_j, x_{j+1}], \\ 0 & jinak \end{cases} \tag{2.4}$$

$$\varphi_n(x) := \begin{cases} \frac{x - x_{n-1}}{x_n - x_{n-1}} & , x \in [x_{n-1}, x_n], \\ 0 & \textit{jinak,} \end{cases} \tag{2.5}$$

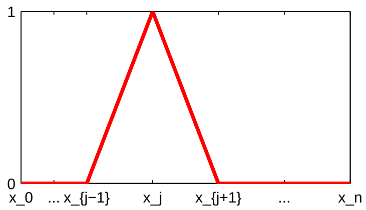
kde $j = 1, \ldots, n-1$.

(b) $\widetilde{L}_n \subset\subset X_2$, $\dim \widetilde{L}_n = n$ *a funkce* $\{\varphi_1, \ldots, \varphi_n\}$, *definované vztahy* (2.4) *a* (2.5) *tvoří bázi tohoto prostoru.*

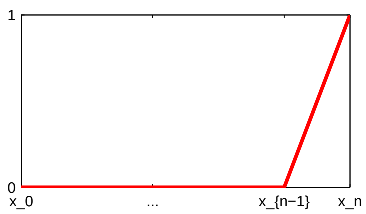
Důkaz. Jde jenom o ověření definic, proto jej zde uvádět nebudeme. □



Obrázek 2.1: Bázová funkce φ_0



Obrázek 2.2: Bázová funkce φ_j, $1 \leq j \leq n-1$



Obrázek 2.3: Bázová funkce φ_n

Řešení Úlohy 2.4. Reálný skalární součin je symetrický, tudíž každá reálná Gramova matice je symetrická. Navíc z definice bázových funkcí je ihned patrné, že pro $|i-j| \geq 2$ bude $a_{ij} = 0$, neboť:

$$a_{ij} = (\varphi_i, \varphi_j) = \int_a^b \varphi_i(x)\varphi_j(x)\,dx = \sum_{k=1}^{n} \int_{x_{k-1}}^{x_k} \varphi_i(x)\varphi_j(x)\,dx = 0,$$

neboť v každém sčítanci je aspoň jedna z funkcí $\varphi_i(x)$, $\varphi_j(x)$ nulová.
Obdobně můžeme odvodit totéž pro případ (b).
V obou případech tedy dostáváme symetrickou, třídiagonální Gramovu matici.
Pro její nenulové prvky v případě (a) platí:

$$a_{00} = (\varphi_0, \varphi_0) = \int_{x_0}^{x_1} \left(\frac{x_1 - x}{x_1 - x_0}\right)^2 dx = \frac{x_1 - x_0}{3}, \tag{2.6}$$

$$\begin{aligned} a_{ii} = (\varphi_i, \varphi_i) = \int_{x_{i-1}}^{x_i} \left(\frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}\right)^2 dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left(\frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i}\right)^2 dx = \\ \frac{x_i - x_{i-1}}{3} + \frac{x_{i+1} - x_i}{3} = \frac{x_{i+1} - x_{i-1}}{3} \quad \forall i = 1, \dots, n-1, \end{aligned} \tag{2.7}$$

$$a_{nn} = (\varphi_n, \varphi_n) = \int_{x_{n-1}}^{x_n} \left(\frac{x - x_{n-1}}{x_n - x_{n-1}}\right)^2 dx = \frac{x_n - x_{n-1}}{3}. \tag{2.8}$$

Prvky nad diagonálou určíme analogicky:

$$\begin{aligned} a_{i,i+1} = (\varphi_i, \varphi_{i+1}) = \int_a^b \varphi_i(x)\varphi_{i+1}(x)\,dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i} \cdot \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}\,dx \\ = \frac{x_{i+1} - x_i}{6} \quad \forall i = 0, \dots, n-1. \end{aligned} \tag{2.9}$$

Zbývá sestavit vektor pravé strany, pro nějž podle úvodní části platí vztahy:

$$(f, \varphi_0) = \frac{1}{x_1 - x_0} \int_{x_0}^{x_1} f(x)(x_1 - x)\,dx, \tag{2.10}$$

$$\begin{aligned} (f, \varphi_i) = \frac{1}{x_i - x_{i-1}} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)(x - x_{i-1})\,dx \\ + \frac{1}{x_{i+1} - x_i} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)(x_{i+1} - x)\,dx, \end{aligned} \tag{2.11}$$

$$(f, \varphi_n) = \frac{1}{x_n - x_{n-1}} \int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x)(x - x_{n-1})\, dx, \tag{2.12}$$

kde $i = 1, \ldots, n-1$.
V případě (b) postupujeme obdobně:

$$\begin{aligned} a_{ii} = (\varphi_i, \varphi_i) = \int_a^b \left(\varphi_i'(x)\right)^2\, dx& \\ = \frac{1}{x_i - x_{i-1}} + \frac{1}{x_{i+1} - x_i} \quad \forall i = 1, \ldots, n-1& \end{aligned} \tag{2.13}$$

$$a_{nn} = (\varphi_n, \varphi_n) = \frac{1}{x_n - x_{n-1}} \tag{2.14}$$

$$a_{i,i+1} = (\varphi_i, \varphi_{i+1}) = -\frac{1}{x_{i+1} - x_i} \quad \forall i = 1, \ldots, n-1 \tag{2.15}$$

$$\begin{aligned} (f, \varphi_i) &= \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{f'(x)}{x_i - x_{i-1}}\, dx - \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{f'(x)}{x_{i+1} - x_i}\, dx \\ &= \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}} - \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} \quad \forall i = 1, \ldots, n-1, \end{aligned} \tag{2.16}$$

$$(f, \varphi_n) = \int_{x_{n-1}}^{x_n} \frac{f'(x)}{x_n - x_{n-1}}\, dx = \frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}}. \tag{2.17}$$

Kapitola 3

Nalezení optimálního dělení

Úvod. V této kapitole se budeme zabývat prostorem $(X_1, (\cdot\,,\cdot))$ a $L_n \subset\subset X_1$, resp. $(X_2, (\cdot\,,\cdot))$ a $\widetilde{L}_n \subset\subset X_2$, definovaných v Úloze 2.4. Jelikož následující úvahy lze provést podobně pro oba případy, dovolujeme si pro přehlednost používat jednotné označení X a L (s patřičným skalárním součinem $(\cdot\,,\cdot)$). Nechť je navíc $n \in \mathbb{N}$, tj. počet dílčích intervalů intervalu $[a, b]$ pevná, předem zvolená. Pro zjednodušení dalšího označení budeme používat symbol Δ místo Δ_n.

V předchozí kapitole jsme ukázali, jak pro pevné dělení Δ intervalu $[a, b]$ a danou funkci $f \in X$ nalézt funkci $g \in L$, která nejlépe aproximuje f v normě prostoru X. Všimněme si, že prostor L a tudíž i funkce g závisí na volbě dělení, tj. $L = L(\Delta)$ a $g = g(\Delta)$! To nás motivuje k tomu, abychom hledali "optimální dělení", neboli $\widehat{\Delta}$ takové, pro které platí:

$$\widehat{\Delta} = \arg \min_{\Delta \in U_{ad}} \|f - g(\Delta)\|, \tag{3.1}$$

kde $U_{ad} \subset \mathbb{R}^{n+1}$ je jistá množina dělení.

Bude-li množina U_{ad} kompaktní a zobrazení $g : U_{ad} \to L$, $\Delta \mapsto g(\Delta)$, $\Delta \in U_{ad}$ spojité, máme zaručeno existenci optimálního dělení. Stačí si totiž uvědomit, že za těchto předpokladů je funkce $\Psi(\Delta) := \|f - g(\Delta)\|$ složením spojitých zobrazení, tudíž sama spojitá a každá spojitá funkce na kompaktní množině nabývá svého minima.

Zdůrazněme, že počet dílčích intervalů $n \in \mathbb{N}$ je pevné, hledáme pouze optimální rozložení uzlů $x_1, x_2, \ldots, x_{n-1}$ (krajní body $x_0 = a$ a $x_n = b$ se nemění).

Přirozeně se nabízí hledat optimální dělení v množině všech možných dělení intervalu $[a, b]$. Bohužel množina

$$\{ (x_0, x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^{n+1};\ a = x_0 < x_1 < \cdots < x_{n-1} < x_n = b \}$$

není uzavřená, tudíž nemůže být ani kompaktní. Proto nemusí existovat optimální dělení ve výše uvedené množině a musíme zúžit obor přípustných dělení.

Buď $0 < \delta \leq (b - a)/n$. Uvažujme následující dělení intervalu $[a, b]$:

$$U_\delta := \{ (x_0, x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^{n+1};\ x_0 = a,\ x_1 \geq x_0 + \delta, \dots, x_n \geq x_{n-1} + \delta,\ x_n = b \}. \tag{3.2}$$

Lemma 3.1. *Množina $U_\delta \subset \mathbb{R}^{n+1}$ je kompaktní.*

Důkaz. Zřejmě $U_\delta \subset [a, b]^{n+1}$, tudíž je omezená. Ke kompaktnosti zbývá ukázat, že U_δ je uzavřená. Mějme proto posloupnost $\{\Delta^k\}_{k=1}^{\infty} \subset U_\delta$, $\Delta^k = (x_0^k, x_1^k, \dots, x_n^k)$ a předpokládejme, že:

$$\exists \Delta = (x_0, x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^{n+1} : \quad \Delta^k \longrightarrow \Delta, \quad k \to \infty,$$

což je ekvivalentní:

$$\forall i = 0, \dots, n : \quad x_i^k \longrightarrow x_i, \quad k \to \infty.$$

Podle předpokladu přitom platí:

$$\forall k \in \mathbb{N}\, \forall i = 0, \dots, n-1 : \quad x_{i+1}^k - x_i^k \geq \delta.$$

Po limitním přechodu pro $k \to \infty$ dostaneme:

$$\forall i = 0, \dots, n-1 : \quad x_{i+1} - x_i \geq \delta.$$

Tedy $\Delta \in U_\delta$ a tudíž je množina $U_\delta \subset \mathbb{R}^{n+1}$ kompaktní. $\square$

V dalším budeme předpokládat, že $U_{ad} = U_\delta$, kde U_δ je definováno právě pomocí (3.2).

Vyšetřeme nyní spojitost zobrazení $g : U_{ad} \to L$, $\Delta \mapsto g(\Delta)$ pro $\Delta \in U_{ad}$, kde $g(\Delta)$ je prvek nejlepší lineární aproximace na $\Delta \in U_{ad}$. Dle předchozí kapitoly:

$$g(\Delta) = \sum_i \alpha_i(\Delta)\varphi_i(\Delta) \quad \forall \Delta \in U_{ad}, \tag{3.3}$$

kde vektor koeficientů lineární kombinace $\alpha(\Delta) = (\alpha_0(\Delta), \dots, \alpha_n(\Delta))^T$, resp. $\alpha(\Delta) = (\alpha_1(\Delta), \dots, \alpha_n(\Delta))^T$ řeší soustavu (2.2):

$$\mathbf{A}(\Delta)\alpha(\Delta) = F(\Delta) \quad \forall \Delta \in U_{ad}. \tag{3.4}$$

Prvky matice $\mathbf{A}(\Delta)$ jsou dány vztahy (2.6)-(2.9), resp. (2.13)-(2.15), a prvky vektoru $F(\Delta)$ mají tvar (2.10)-(2.12), resp. (2.16)-(2.17).

Ze vztahu (3.3) je patrné, že zobrazení $g(\Delta)$ bude spojité na množině U_{ad} jakmile tam budou $\alpha_i(\Delta)$ a $\varphi_i(\Delta)$ spojité. Není těžké si rozmyslet, že je to pravda jak pro $X = X_1$, tak pro $X = X_2$. Na druhou stranu, budou-li $\mathbf{A}(\Delta)$ a $F(\Delta)$, $\Delta \in U_{ad}$ třídy C^1, bude zobrazení $\alpha(\Delta)$ třídy C^1 (viz. Větu 1.1). K tomu, abychom mohli použít teoretické výsledky první kapitoly, je zapotřebí mít funkce $\mathbf{A}$ a F alespoň třídy C^1. Vyšetřeme tedy za jakých podmínek to nastává.

(a) Nechť $X = X_1$ a $L = L_n$. Z (2.6)-(2.9) je hned zřejmé, že maticová funkce $\mathbf{A}(\Delta)$, $\Delta \in U_{ad}$ je spojitě diferencovatelná podle x_i pro každé $i = 1, \dots, n-1$, tudíž je třídy C^1 na U_{ad}. Symbolem $\mathbf{A}'(\Delta; x_i)$ označme derivaci matice $\mathbf{A}(\Delta)$ podle proměnné x_i. Zřejmě v matici $\mathbf{A}'(\Delta; x_i)$ je pouze 6 nenulových členů pro $i = 1, \dots, n-1$ (protože krajní body $x_0 = a$ a $x_n = b$ jsou pevné, budou nás zajímat jenom derivace podle x_i pro $i = 1, \dots, n-1$):

$$\frac{\partial a_{i-1,i-1}}{\partial x_i}(\Delta) = \frac{1}{3}, \tag{3.5}$$

$$\frac{\partial a_{ii}}{\partial x_i}(\Delta) = 0, \tag{3.6}$$

$$\frac{\partial a_{i+1,i+1}}{\partial x_i}(\Delta) = -\frac{1}{3}, \tag{3.7}$$

$$\frac{\partial a_{i-1,i}}{\partial x_i} = \frac{\partial a_{i,i-1}}{\partial x_i}(\Delta) = \frac{1}{6}, \tag{3.8}$$

$$\frac{\partial a_{i,i+1}}{\partial x_i} = \frac{\partial a_{i+1,i}}{\partial x_i}(\Delta) = -\frac{1}{6}, \tag{3.9}$$

pro každé $i = 1, \ldots, n-1$. Je tedy:

$$\mathbf{A}'(\Delta; x_i) = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & & & \\ \ddots & \frac{1}{3} & \frac{1}{6} & & \\ & \frac{1}{6} & 0 & -\frac{1}{6} & \\ & & -\frac{1}{6} & -\frac{1}{3} & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

kde kromě vyznačených jsou všechny ostatní prvky matice $\mathbf{A}'(\Delta; x_i)$ nulové.

Nechť $f \in C([a,b])$. Potom neurčitý Lebesgueův integrál $H(x) = \int_a^x f(t)\,dt$ je primitivní funkce k f na intervalu $[a,b]$ a platí: $H'(x) = f(x)\ \forall x \in [a,b]$. Tuto vlastnost využijeme při počítání $F'(\Delta; x_i)$, kde $F'(\Delta; x_i)$ značí derivaci vektorové funkce $F(\Delta)$ podle proměnné x_i. Všimněme si, že nejvýše 3 složky pravé strany (2.10)-(2.12) závisí na x_i ($i = 1, \ldots, n-1$) a to prostřednictvím $\varphi_{i-1}(\Delta)$, $\varphi_i(\Delta)$ a $\varphi_{i+1}(\Delta)$. Derivací pravé strany $F(\Delta)$ podle x_i zůstanou nenulové tyto složky:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x_i}(f, \varphi_{i-1}(\Delta)) &= \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{1}{x_i - x_{i-1}} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)(x_i - x)\,dx\right) \\
&= \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{x_i}{x_i - x_{i-1}} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\,dx\right) - \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{1}{x_i - x_{i-1}} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)x\,dx\right) \\
&= \frac{x_i - x_{i-1} - x_i}{(x_i - x_{i-1})^2} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\,dx + \frac{x_i f(x_i)}{x_i - x_{i-1}} \\
&\quad + \frac{1}{(x_i - x_{i-1})^2} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)x\,dx - \frac{f(x_i)x_i}{x_i - x_{i-1}} \\
&= \frac{1}{(x_i - x_{i-1})^2} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)(x - x_{i-1})\,dx. \qquad (3.10)
\end{aligned}$$

Obdobně dostaneme:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x_i}(f, \varphi_i(\Delta)) &= \frac{1}{(x_{i+1} - x_i)^2} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)(x_{i+1} - x)\,dx \\
&\quad - \frac{1}{(x_i - x_{i-1})^2} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)(x - x_{i-1})\,dx, \qquad (3.11)
\end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(f, \varphi_{i+1}(\Delta)) = -\frac{1}{(x_{i+1} - x_i)^2} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)(x_{i+1} - x)\,dx \qquad (3.12)$$

pro každé $i = 1, \ldots, n-1$.
Ukažme, že tyto funkce spojitě závisí na $\Delta \in U_{ad}$. K tomu využijeme fakt, že neurčitý Lebesgueův integrál integrovatelné funkce je absolutně spojitý jako funkce integrační meze. Upravme například (3.10) následovně:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x_i}(f, \varphi_{i-1}(\Delta)) &= \frac{1}{(x_i - x_{i-1})^2}\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)(x - x_{i-1})\,dx \\ &= \frac{1}{(x_i - x_{i-1})^2}\int_a^{x_i} xf(x)\,dx - \frac{1}{(x_i - x_{i-1})^2}\int_a^{x_{i-1}} xf(x)\,dx \\ &\quad - \frac{x_{i-1}}{(x_i - x_{i-1})^2}\int_a^{x_i} f(x)\,dx + \frac{x_{i-1}}{(x_i - x_{i-1})^2}\int_a^{x_{i-1}} f(x)\,dx.\end{aligned}$$

Tudíž $\frac{\partial}{\partial x_i}(f, \varphi_{i-1}) \in C(U_{ad})$. Analogicky můžeme dokázat, že $\frac{\partial}{\partial x_i}(f, \varphi_j) \in C(U_{ad})$ pro každé $i = 1, \ldots, n-1$ a $j = 0, \ldots, n$, tedy $F(\Delta) \in C^1(U_{ad})$.

(b) Je-li $X = X_2$ a $L = \widetilde{L}_n$, potom vztahy (2.13)-(2.15) definují C^1 maticovou funkci a její prvky jsou dány vztahy:

$$\frac{\partial a_{i-1,i-1}}{\partial x_i}(\Delta) = -\frac{1}{(x_i - x_{i-1})^2}, \tag{3.13}$$

$$\frac{\partial a_{ii}}{\partial x_i}(\Delta) = -\frac{1}{(x_i - x_{i-1})^2} + \frac{1}{(x_{i+1} - x_i)^2}, \tag{3.14}$$

$$\frac{\partial a_{i+1,i+1}}{\partial x_i}(\Delta) = \frac{1}{(x_{i+1} - x_i)^2}, \tag{3.15}$$

$$\frac{\partial a_{i-1,i}}{\partial x_i} = \frac{\partial a_{i,i-1}}{\partial x_i}(\Delta) = \frac{1}{(x_i - x_{i-1})^2}, \tag{3.16}$$

$$\frac{\partial a_{i,i+1}}{\partial x_i} = \frac{\partial a_{i+1,i}}{\partial x_i}(\Delta) = -\frac{1}{(x_{i+1} - x_i)^2}, \tag{3.17}$$

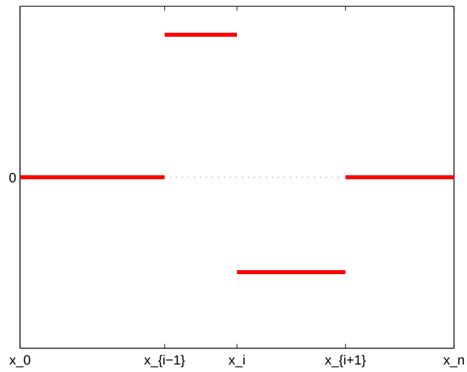
pro každé $i = 1, \ldots, n-1$. Ostatní prvky matice $\mathbf{A}'(\Delta; x_i)$ jsou nulové.

Naopak diferencovatelnost $F(\Delta)$ v tomto případě vyžaduje, aby funkce f měla spojitou slabou derivaci. Potom analogicky, jako jsme postupovali při odvození (3.10)-(3.12) můžeme určit derivaci $F'(\Delta; x_i)$. K tomu potřebujeme tvar slabých derivací bázových funkcí:

$$\varphi'_{i-1}(x) = \begin{cases} \frac{1}{x_{i-1} - x_{i-2}} & , x \in (x_{i-2}, x_{i-1}), \\ \frac{-1}{x_i - x_{i-1}} & , x \in (x_{i-1}, x_i), \\ 0 & \text{jinak} \end{cases}$$

$$\varphi_i'(x) = \begin{cases} \frac{1}{x_i - x_{i-1}} & , x \in (x_{i-1}, x_i), \\ \frac{-1}{x_{i+1} - x_i} & , x \in (x_i, x_{i+1}), \\ 0 & \text{jinak} \end{cases}$$

$$\varphi_{i+1}'(x) = \begin{cases} \frac{1}{x_{i+1} - x_i} & , x \in (x_i, x_{i+1}), \\ \frac{-1}{x_{i+2} - x_{i+1}} & , x \in (x_{i+1}, x_{i+2}), \\ 0 & \text{jinak.} \end{cases}$$



Obrázek 3.1: Slabá derivace bázové funkce φ_i

Potom platí:

$$\begin{aligned} \frac{\partial (f, \varphi_{i-1})}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f'(x) \varphi_{i-1}'(x)\, dx = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{-1}{x_i - x_{i-1}} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f'(x)\, dx \right) \\ &= \frac{1}{(x_i - x_{i-1})^2} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f'(x)\, dx - \frac{f'(x_i)}{x_i - x_{i-1}} \\ &= \frac{f(x_i) - f(x_{i-1}) - f'(x_i)(x_i - x_{i-1})}{(x_i - x_{i-1})^2}, \quad (3.18) \end{aligned}$$

a vidíme, že pravá strana spojitě závisí na $\Delta \in U_{ad}$, neboť $f, f' \in C([a,b])$. Obdobně:

$$\begin{aligned} \frac{\partial (f, \varphi_i)}{\partial x_i} = &- \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i) - f'(x_i)(x_{i+1} - x_i)}{(x_{i+1} - x_i)^2} \\ &- \frac{f(x_i) - f(x_{i-1}) - f'(x_i)(x_i - x_{i-1})}{(x_i - x_{i-1})^2}, \quad (3.19) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial(f,\varphi_{i+1})}{\partial x_i} = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i) - f'(x_i)(x_{i+1}-x_i)}{(x_{i+1}-x_i)^2}, \tag{3.20}$$

pro $i = 1,\dots,n-1$. Ostatní složky $F'(\Delta; x_i)$ jsou i v tomto případě nulové.

Shrňme dosavadní výsledky do dvou vět.

Věta 3.2. (*a*) *Nechť* $f \in C(a,b)$. *Potom maticová funkce* $\mathbf{A} : U_{ad} \to \mathbb{R}^{(n+1)\times(n+1)}$ *definovaná vztahy* (2.6)-(2.9) *a vektorová funkce* $F : U_{ad} \to \mathbb{R}^{n+1}$ *definovaná vztahy* (2.10)-(2.12) *jsou třídy* $C^1(U_{ad})$ *a její směrové derivace* $\mathbf{A}'(\Delta; x_i)$, *resp.* $F'(\Delta; x_i)$ *v bodě* $\Delta \in U_{ad}$ *a ve směru* x_i *(*$i = 1,\dots,n-1$*) splňují* (3.5)-(3.9), *resp.* (3.10)-(3.12).

(*b*) *Nechť* $f \in X_2$ *má spojitou slabou derivaci:* $f' \in C([a,b])$. *Potom funkce* $\mathbf{A} : U_{ad} \to \mathbb{R}^{n\times n}$ *a* $F : U_{ad} \to \mathbb{R}^n$ *definované vztahy* (2.13)-(2.15) *a* (2.16)-(2.17) *jsou spojitě diferencovatelné na množině* U_{ad} *a pro její směrové derivace v bodě* $\Delta \in U_{ad}$ *a ve směru* x_i *(*$i = 1,\dots,n-1$*) platí vztahy* (3.13)-(3.17), *resp.* (3.18)-(3.20).

Věta 3.3. *Nechť* $f \in X$ *splňuje předpoklady předchozí věty. Potom úloha* (3.1) *má v množině* U_{ad} *řešení, t.j. existuje optimální dělení* $\widehat{\Delta} \in U_{ad}$ *intervalu* $[a,b]$ *o* n *uzlech splňující:*

$$\|f - g(\widehat{\Delta})\| = \min_{\Delta\in U_{ad}} \min_{h\in L(\Delta)} \|f-h\|.$$

Je snadno vidět, že řešení úlohy (3.1) je ekvivalentní minimalizaci funkce $\Phi : U_{ad} \to \mathbb{R}$ definované předpisem:

$$\Phi(\Delta) := \|f - g(\Delta)\|^2 = \|f\|^2 + \|g(\Delta)\|^2 - 2(f, g(\Delta)).$$

První člen v definici $\Phi(\Delta)$ nezávisí na dělení Δ, tudíž k určení optimálního dělení stačí minimalizovat následující funkci:

$$\mathcal{J}(\Delta) := \|g(\Delta)\|^2 - 2(f, g(\Delta)) \quad \forall \Delta \in U_{ad}. \tag{3.21}$$

Po úpravách dostaneme ekvivalentní zápis:

$$\begin{aligned}
\mathcal{J}(\Delta) =& (g(\Delta), g(\Delta)) - 2(f, g(\Delta)) \\
=& (\sum_i \alpha_i(\Delta)\varphi_i(\Delta), \sum_j \alpha_j(\Delta)\varphi_j(\Delta)) - 2(f, \sum_i \alpha_i(\Delta)\varphi_i(\Delta)) \\
=& \sum_{i,j} \alpha_i(\Delta)\alpha_j(\Delta)(\varphi_i(\Delta), \varphi_j(\Delta)) - 2\sum_i \alpha_i(\Delta)(f, \varphi_i(\Delta)) \\
=& \langle \alpha(\Delta), \underbrace{\mathbf{A}(\Delta)\alpha(\Delta)}_{=F(\Delta)} \rangle - 2\langle \alpha(\Delta), F(\Delta) \rangle \qquad (3.22) \\
=& - \langle \alpha(\Delta), F(\Delta) \rangle. \qquad (3.23)
\end{aligned}$$

Aby nedošlo k nedorozumění o jaký skalární součin se jedná, užili jsme značení $\langle \cdot\,, \cdot \rangle$ pro standardní skalární součin v $\mathbb{R}^{n+1}$, resp. $\mathbb{R}^n$, stejně jako v první kapitole.

Porovnáme-li $\mathcal{J}(\Delta)$ prostřednictvím (3.22) s funkcionálem definovaným v Dodatku první kapitoly, zjistíme, že se rovnají až na multiplikativní konstantu. Jsou-li navíc splněny předpoklady Věty 3.2, platí dle zmíněného dodatku vztah pro směrovou derivaci $\mathcal{J}'(\Delta; x_i)$ v bodě $\Delta \in U_{ad}$ a ve směru x_i $(i = 1, \dots, n-1)$:

$$\mathcal{J}'(\Delta; x_i) = \langle \alpha(\Delta), \mathbf{A}'(\Delta; x_i)\alpha(\Delta) - 2F'(\Delta; x_i) \rangle. \qquad (3.24)$$

Kapitola 4

Numerické experimenty

Úloha nalezení optimálního dělení intervalu byla naprogramována pro Úlohu 2.4 s následujícími daty:

- $(a, b) = (0, 1)$,
- $f(x) = x^\beta$, pro $\beta = 0.51, 0.65, 0.8$,
- $U_{ad} = U_\delta$ pro $\delta = 10^{-4}, 10^{-5}, 10^{-6}$, kde U_δ je dána vztahem (3.2),
- $n = 2, 4, 8, 16, 32, 64, 128$.

Zřejmě $x^\beta = 0$ pro $x = 0$ a $\beta > 0$. K tomu, aby funkce $f(x) = x^\beta \in W^{1,2}(0, 1)$, musí platit následující omezení na parametr β:

$$\|x^\beta\|_{X_2}^2 = \int_0^1 ((x^\beta)')^2 \, dx = \beta^2 \int_0^1 x^{2\beta-2} \, dx < \infty \iff 2\beta - 2 > -1 \iff \beta > \frac{1}{2}.$$

Potom $f \in X_2$ a současně $f \in X_1$, navíc platí:

$$\|f\|_{X_1}^2 = \int_0^1 x^{2\beta} \, dx = \frac{1}{2\beta + 1},$$

$$\|f\|_{X_2}^2 = \beta^2 \int_0^1 x^{2\beta-2} \, dx = \frac{\beta^2}{2\beta - 1}.$$

Podle definice z předchozí kapitoly (viz. (3.1)), optimální dělení je dělení $\widehat{\Delta}_n \in U_{ad}$ pro které:

$$\Phi(\widehat{\Delta}_n) = \min_{\Delta_n \in U_{ad}} \Phi(\Delta_n) = \min_{\Delta_n \in U_{ad}} \|f - g(\Delta_n)\|^2 = \|f\|^2 + \min_{\Delta_n \in U_{ad}} \mathcal{J}(\Delta_n),$$

kde funkcionál $\mathcal{J}$ je dán předpisem (3.21), nebo ekvivalentně (3.23).

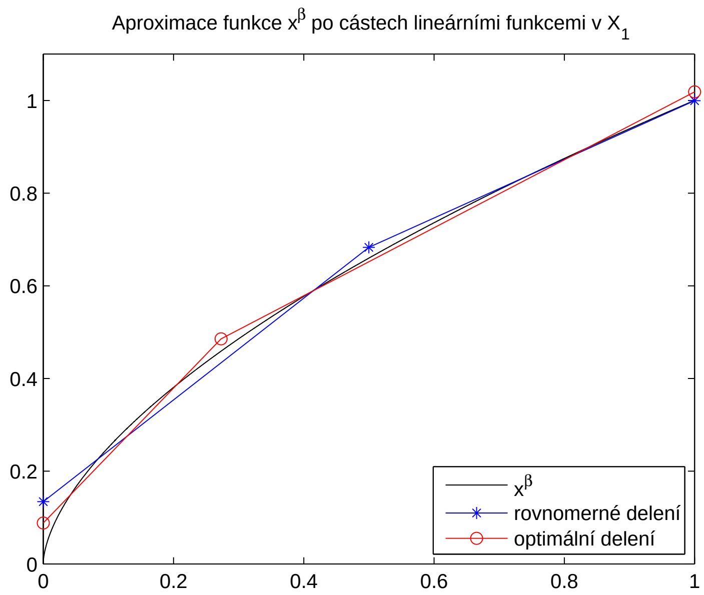
Nazvěme veličinu $\Phi(\Delta_n)$ *chybou aproximace na dělení* $\Delta_n \in U_{ad}$.

Poznámka. Jeden z praktických aspektů definice množiny $U_{ad} := U_\delta$ je to, že sousedící uzly se nemohou dostat "příliš" blízko k sobě: jinak by se mohlo stát, že $x_j \approx x_{j+1}$ a při sestavení matice $\mathbf{A}(\Delta_n)$ na počítači bychom dostali chybové hlášení o dělení nulovou. Abychom se tomu vyhnuli, nabízí se definovat množinu U_{ad} právě vztahem (3.2), který navíc dovoluje uzlům dělení relativně velkou flexibilitu.

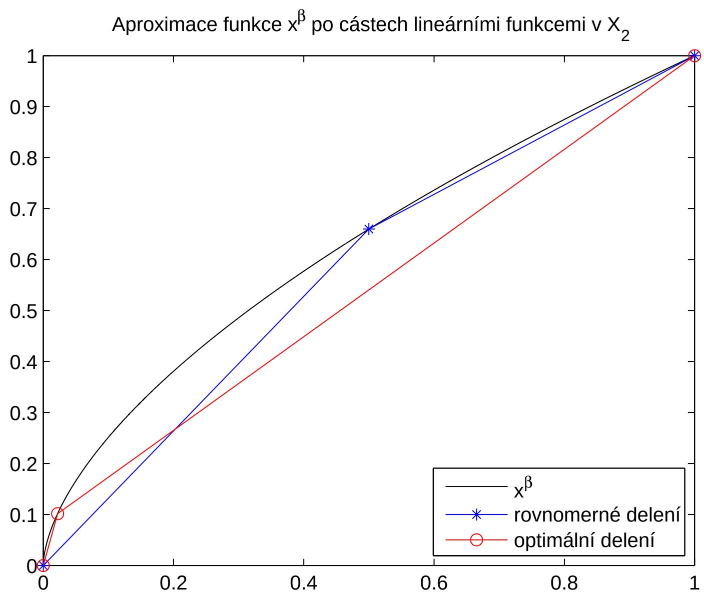
Co se týče vlastní realizace, numerické výsledky byly získány pomocí komerčního softwaru MATLAB©, přičemž k minimalizaci funkcionálu $\mathcal{J}(\Delta_n)$ byla použita funkce *fmincon*. Ta je založena na kvazi-Newtonově metodě k nalezení vázaného extrému reálné funkce více proměnných. Pro bližší informace o použité funkci bychom čtenáře odkázali na online help, viz. stránky [3]. Zmíníme se však o jedné důležité vlastnosti funkce *fmincon*, a sice, že jako vstupní hodnotu jí můžeme předat gradient funkce $\mathcal{J}$. Tím usnadníme minimalizaci , protože díky jednoduchým tvarům matic $\mathbf{A}'(\Delta_n; x_i)$ a vektorů $F'(\Delta_n; x_i)$ je výpočet $\mathcal{J}'(\Delta_n; x_i)$ podle (3.24) zcela nenáročný.

Poznámka. Vzhledem k tomu, jak je norma definována v prostorech X_1 a X_2, očekáváme, že dělení bude "citlivější" v blízkosti nuly. Tedy uzly optimálního dělení se budou hromadit kolem nuly a to hlavně pro $X = X_2$, neboť tatáž funkce x^β má větší normu v X_2. Navíc lze předpokládat, že čím bude β blíže hraniční hodnotě $\frac{1}{2}$, tím razantnější bude přemisťování uzlů.

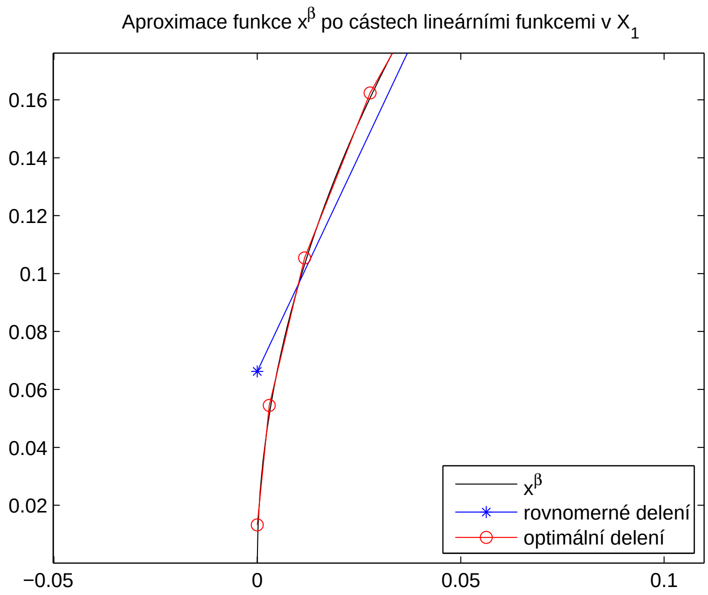
O tom, že tato intuice je správná, svědčí následující čtyři obrázky.



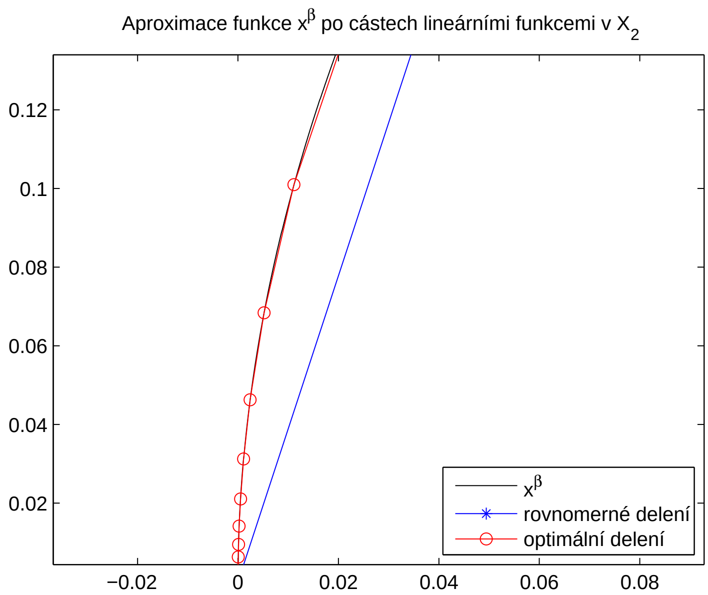
Obrázek 4.1: $\beta = 0.65$, $n = 2$, $\delta = 10^{-5}$



Obrázek 4.2: $\beta = 0.65$, $n = 2$, $\delta = 10^{-5}$



Obrázek 4.3: $\beta = 0.51$, $n = 16$, $\delta = 10^{-5}$ (zvětšený)



Obrázek 4.4: $\beta = 0.51$, $n = 16$, $\delta = 10^{-5}$ (zvětšený)

Zvolíme-li β z intervalu $(\frac{1}{2}, 1)$, bude funkce x^β příliš regulární, jakožto prvek $L^2(0,1)$ a proto nedostaneme podstatně lepší odhady pomocí optimálního dělení: řád konvergence zůstává stejný, jako při aproximaci na rovnoměrném dělení. Navíc ani posun uzlů není dostatečně markantní, proto jsou výsledky stejné pro $\delta = 10^{-4}, 10^{-5}, 10^{-6}$.

Chyby aproximace na rovnoměrném a optimálním dělení jsou znázorněny v následujících tabulkách, resp. grafech.

Tabulka 4.1: Chyby aproximace pro $\beta = 0.51$ v X_1

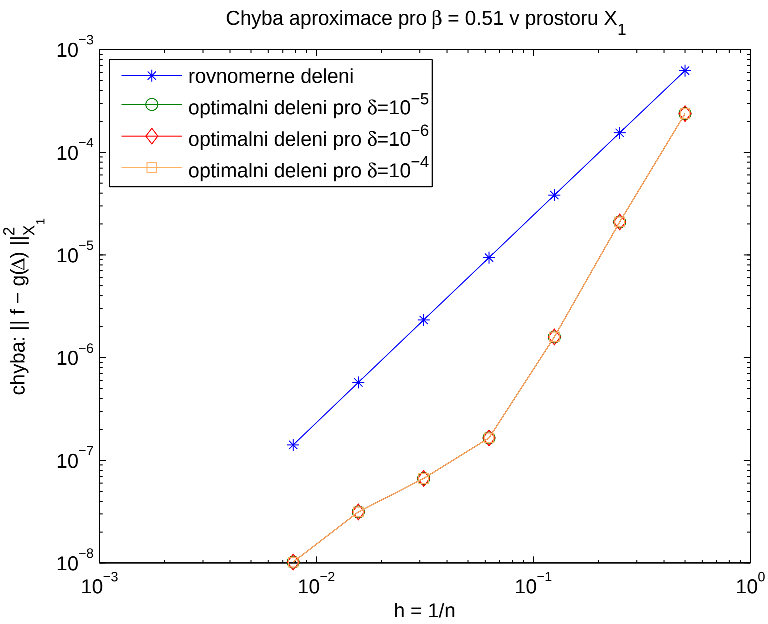
	rovnoměrné dělení	optimální dělení
n = 2	0.00062352225591	0.00023741975036
n = 4	0.00015489119360	0.00002096300694
n = 8	0.00003822152676	0.00000159113760
n = 16	0.00000942580440	0.00000016534591
n = 32	0.00000232413223	0.00000006664978
n = 64	0.00000057304132	0.00000003148067
n = 128	0.00000014128789	0.00000001021295

Tabulka 4.2: Chyby aproximace pro $\beta = 0.65$ v X_1

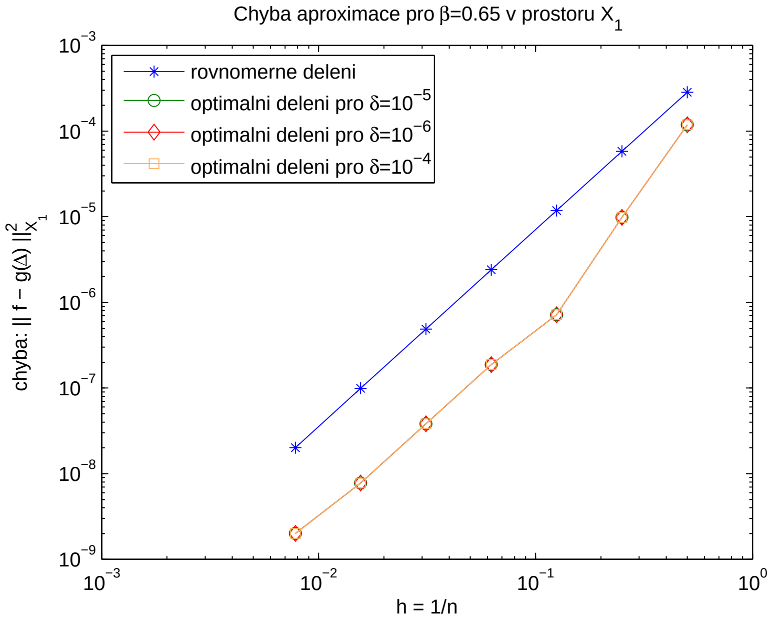
	rovnoměrné dělení	optimální dělení
n = 2	0.00028398398248	0.00011839512620
n = 4	0.00005823891027	0.00000982820914
n = 8	0.00001184946329	0.00000071893953
n = 16	0.00000240764332	0.00000018807677
n = 32	0.00000048899424	0.00000003828210
n = 64	0.00000009930233	0.00000000777939
n = 128	0.00000002016476	0.00000000200715

Tabulka 4.3: Chyby aproximace pro $\beta = 0.8$ v X_1

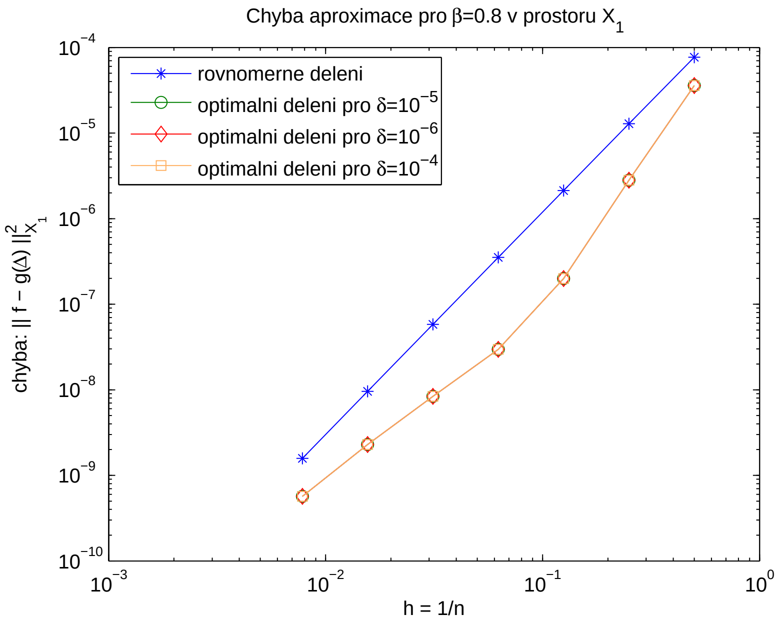
	rovnoměrné dělení	optimální dělení
n = 2	0.00007678955287	0.00003583587987
n = 4	0.00001286030803	0.00000281719338
n = 8	0.00000213134063	0.00000019963875
n = 16	0.00000035217639	0.00000002964207
n = 32	0.00000005812711	0.00000000839131
n = 64	0.00000000958974	0.00000000228827
n = 128	0.00000000158130	0.00000000056859



Obrázek 4.5: $\beta = 0.51$ v prostoru X_1

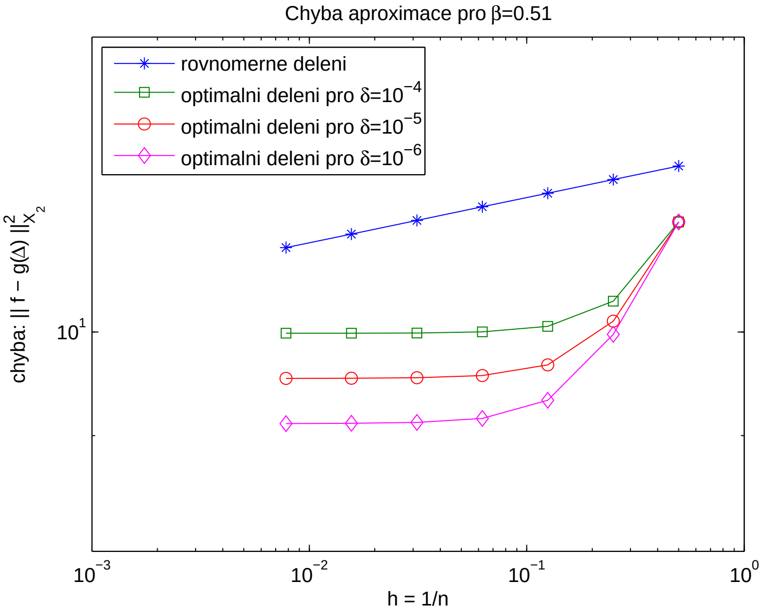


Obrázek 4.6: $\beta = 0.65$ v prostoru X_1

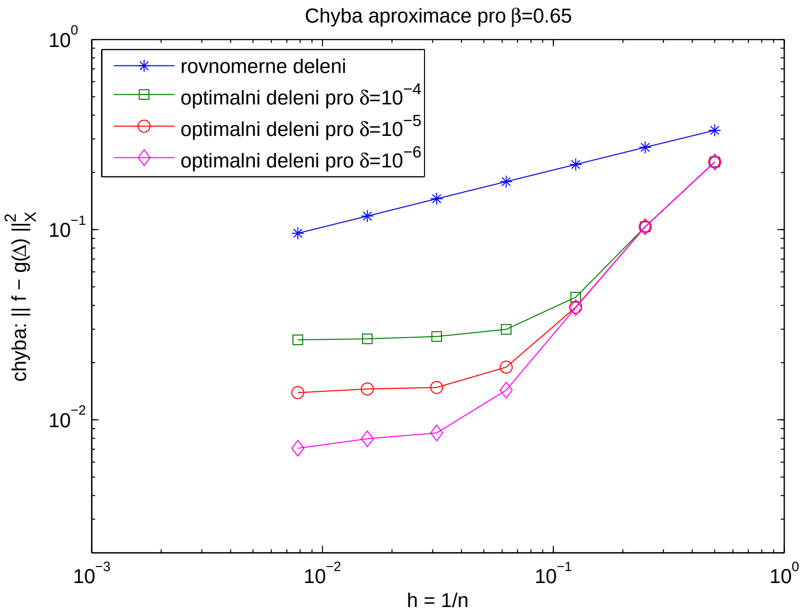


Obrázek 4.7: $\beta = 0.8$ v prostoru X_1

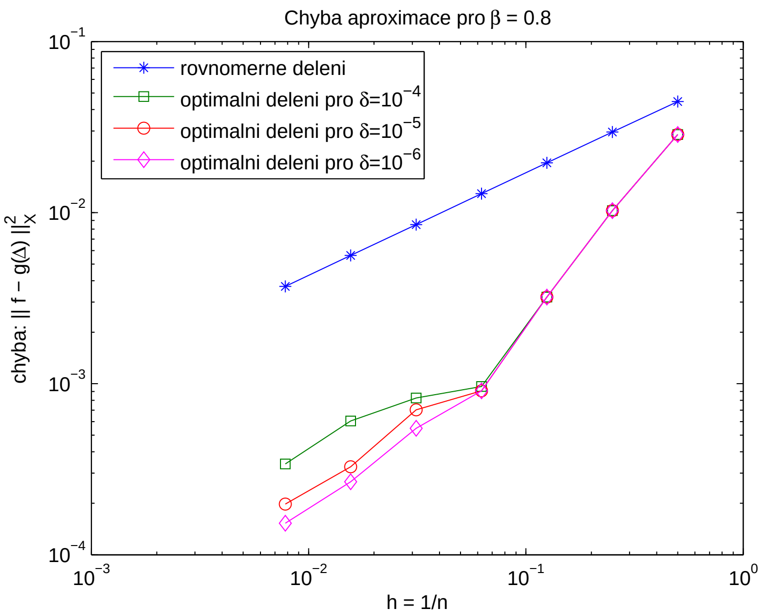
Provedeme-li nyní numerické testy pro stejné funkce x^β v prostoru X_2, můžeme spatřit více odlišností. Čím je β blíž $\frac{1}{2}$, tím je výraznější vliv volby množiny U_δ. Pro menší δ dostaneme zřejmě lepší aproximace, neboť dovolujeme dělícím uzlům větší svobodu. Při aplikaci se ale brzy dostane podstatná část dělících bodů (tj. uzly, které jsou blíž místa, kde funkce je "citlivější") δ-blízko k sobě a tím pádem chyba aproximace klesá velmi pomalu. Jak je z obrázků dále patrné, nebude-li funkce x^β "příliš singulární", můžeme pomocí optimálního dělení zlepšit i řád konvergence.



Obrázek 4.8: $\beta = 0.51$ v prostoru X_2



Obrázek 4.9: $\beta = 0.65$ v prostoru X_2



Obrázek 4.10: $\beta = 0.8$ v prostoru X_2

Tabulka 4.4: Chyby aproximace pro $\beta = 0.51$ v X_2

	rovnoměrné dělení	optimální dělení pro $\delta = 10^{-4}$	optimální dělení pro $\delta = 10^{-5}$	optimální dělení pro $\delta = 10^{-6}$
n = 2	11.84142434248926	11.18605046036190	11.18605046061797	11.18605046114404
n = 4	11.67886536296823	10.31909658421517	10.11170323189256	9.97703384738671
n = 8	11.51819867257026	10.05789955849110	9.67131147609378	9.32924686177665
n = 16	11.35965438404583	10.00169222054870	9.56693424926088	9.15879677302799
n = 32	11.20327021923588	9.99026332072150	9.54563082499027	9.12089220585063
n = 64	11.04903337691056	9.98876410943054	9.54025085888399	9.11394982021114
n = 128	10.89691854176243	9.98826042719646	9.54003432969108	9.11075572908037

Tabulka 4.5: Chyby aproximace pro $\beta = 0.65$ v X_2

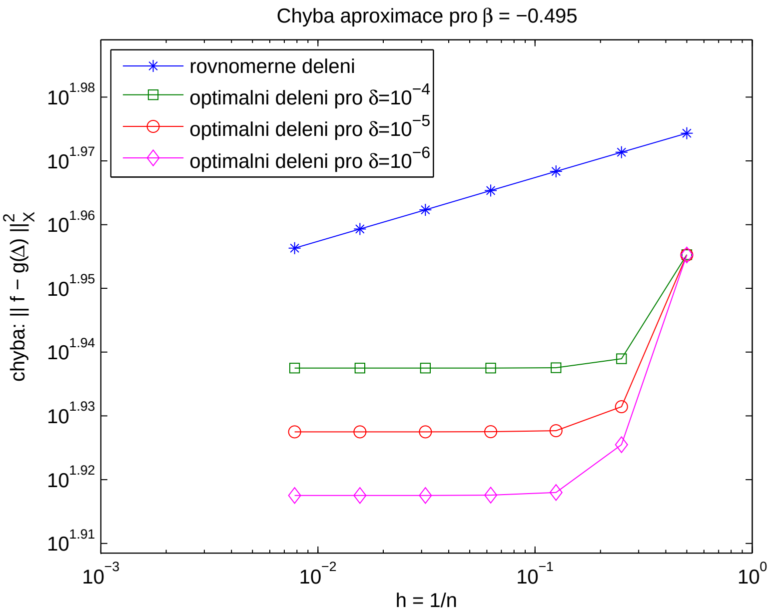
	rovnoměrné dělení	optimální dělení pro $\delta = 10^{-4}$	optimální dělení pro $\delta = 10^{-5}$	optimální dělení pro $\delta = 10^{-6}$
n = 2	0.33294979525939	0.22714505836206	0.22714505857262	0.22714505859395
n = 4	0.27078464305353	0.10352453452236	0.10352453821588	0.10352455266210
n = 8	0.22003387502107	0.04411350034908	0.03909053710078	0.03889509464718
n = 16	0.17874528277935	0.02990341114025	0.01894271227061	0.01432676352092
n = 32	0.14519185341497	0.02739967057967	0.01478576353340	0.00853886812035
n = 64	0.11793382371975	0.02665509616114	0.01453241547296	0.00795158144360
n = 128	0.09579237917629	0.02633895826365	0.01389864808287	0.00709512578625

Tabulka 4.6: Chyby aproximace pro $\beta = 0.8$ v X_2

	rovnoměrné dělení	optimální dělení pro $\delta = 10^{-4}$	optimální dělení pro $\delta = 10^{-5}$	optimální dělení pro $\delta = 10^{-6}$
n = 2	0.04455546588784	0.02859997268447	0.02859997268262	0.02859997268245
n = 4	0.02954779147936	0.01027896703247	0.01027898905710	0.01027896849152
n = 8	0.01953303352185	0.00320644764743	0.00320643198422	0.00320643248219
n = 16	0.01289673544257	0.00096336625285	0.00090824488734	0.00090824839835
n = 32	0.00851111018095	0.00082557963985	0.00070296864441	0.00054840416250
n = 64	0.00561584829385	0.00060530244619	0.00032728215698	0.00026709560721
n = 128	0.00370523055880	0.00033983144021	0.00019789475206	0.00015289311169

Na Obrázcích 4.5 - 4.7 jsme viděli, jak se chová chyba aproximace na optimálním dělení pro regulární funkce v prostoru X_1. Ukážeme nakonec případ, kdy funkce x^β je dost singulární, tj. β je blízko hraniční hodnotě $-\frac{1}{2}$, neboť

$$x^\beta \in L^2(0,1) \quad \Leftrightarrow \quad \beta > -\frac{1}{2}.$$



Obrázek 4.11: $\beta = -0.495$ v prostoru X_1

Tabulka 4.7: Chyby aproximace pro $\beta = -0.495$ v X_1

	rovnoměrné dělení	optimální dělení pro $\delta = 10^{-4}$	optimální dělení pro $\delta = 10^{-5}$	optimálndělení pro $\delta = 10^{-6}$
n = 2	94.26226896784705	90.21543172644914	90.20521009650783	90.20521009933839
n = 4	93.61819670873123	86.88904963759668	85.39391948286800	84.23276243677036
n = 8	92.97156445667628	86.60683976229109	84.66151144353450	82.79267761821302
n = 16	92.32936299465104	86.59699600660819	84.62674967686891	82.71016414864283
n = 32	91.69159750118368	86.59662804575063	84.62599532011830	82.69942290926704
n = 64	91.05823737322737	86.59638536318295	84.62535248158771	82.69909706634400
n = 128	90.42925218308477	86.59635626227555	84.62526621155854	82.69896216938525

Literatura

[1] Haslinger J., Mäkinen R. A.: *Introduction to Shape Optimization: Theory, Approximation and Computation*, Advances in Design and Control, SIAM, 2003.

[2] Lukeš J.: *Zápisky z funkcionální analýzy*, Nakladatelství Karolinum, 2003.

[3] `http://www.mathworks.com/access/helpdesk/help/toolbox/optim/index.html?/access/helpdesk/help/toolbox/optim/ug/fmincon.html`