Pokroky matematiky, fyziky a astronomie

Ivan Hlaváček

Jak řešit úlohy s nejistými vstupními daty?

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie, Vol. 44 (1999), No. 2, 111--116

Persistent URL: http://dml.cz/dmlcz/140988

Jak řešit úlohy s nejistými vstupními daty?

Ivan Hlaváček, Praha

Obrovský pokrok v rozvoji výpočtové techniky a slibné perspektivy jejího dalšího vývoje umožňují dnes při matematickém modelování a řešení problémů techniky, přírodních i společenských věd vystihnout realitu lépe než dříve.

Tak na rozdíl od klasického přístupu, který k modelování používá diferenciální, resp. integrální rovnice či nerovnice s jednoznačně zadanými vstupními daty (tj. koeficienty rovnic, pravými stranami, okrajovými a počátečními podmínkami atd.), můžeme nyní přihlédnout i k nejistotám v zadání vstupních dat. Taková situace se vyskytuje v mnoha technických a vědeckých oborech. Vstupní parametry se totiž obvykle získají ze dvou kroků: z experimentálních měření a z následného řešení příslušné inverzní (identifikační) úlohy. Oba tyto procesy jsou však zatíženy chybami — „šumem“. Nevyhnutelné chyby v měření se pak sčítají s chybou přibližného řešení inverzní úlohy.

Typickým příkladem může být určení fyzikálních parametrů, modelujeme-li geofyzikální procesy v hloubce zemské kůry, kam však již nedosahuje vliv našich výzkumných technických metod (vrtů, umělých otřesů, umělých elektrických polí apod.). V druhé části článku ukážeme řadu dalších příkladů na úlohy s nejistými daty.

Je ovšem zřejmé, že jak teorie, tak i numerické řešení úloh s nejistými daty bude značně složitější a výpočty náročnější než u klasického přístupu.

Pro úlohy s nejistými vstupními daty lze použít dva rozdílné přístupy: *stochastický* (pravděpodobnostní) anebo tzv. *metodu spolehlivého řešení* (nejhoršího scénáře). Zatímco stochastický přístup se těší pozornosti matematiků již několik desítek let — viz např. Friedman [1], Ikeda a Watanabe [15], Walsh [20], Holden a kol. [12], metoda spolehlivého řešení byla navržena a studována poměrně nedávno — viz Hlaváček [3–7], Chleboun [13, 14, 11]. V tomto přehledném článku se po krátké informaci o stochastickém přístupu věnujeme metodě spolehlivého řešení (MSŘ). Jak uvidíme z obecné definice, tato metoda v podstatě účinkuje jako „anti-optimální“ řízení a je formálně shodná s metodami optimálního návrhu. V tom spočívá jedna z jejích hlavních předností.

Stojí za zmínku, že v lineární algebře již existuje teorie úloh s nejistými vstupními daty, jejíž některé části lze považovat za speciální případ MSŘ. Je to analýza tzv. intervalových (resp. nepřesných) matic, viz např. Rohn [19], resp. Nedoma [18]. (Intervalová matice je množina matic, jejichž každý prvek patří do jistého intervalu.)

Ve srovnání se stochastickým přístupem je MSŘ pesimističtější, avšak zůstává „na straně bezpečnosti“. Zdůrazňuje totiž „nejhorší“ data z dané množiny, i když pravděpodobnost jejich výskytu je malá.

Ing. Ivan Hlaváček, DrSc. (1933), Matematický ústav AV ČR, Žitná 25, 115 67 Praha 1.

1. Stochastická metoda

Tato metoda se zakládá na předpokladu, že nejistá vstupní data můžeme považovat za stochastické veličiny (ať už je tento fakt důsledkem jejich reálné náhodnosti, nebo pochází z nedostatku našich informací). Potom správným matematickým modelem takové situace jsou tzv. *stochastické diferenciální* (resp. integrální) *rovnice* (SDR) (viz např. Walsh [20], Holden a kol. [12]).

Základními pojmy teorie SDR je tzv. „bílý šum" (white noise) a Itôův nebo Stratonovichův integrál. Definice těchto pojmů čtenář najde např. v knize Holden a kol. [12]. Řešení SDR se hledá buď v Sobolevově prostoru $H^{-n}(\mathbb{R}^d)$, kde přirozené číslo n je dostatečně velké, nebo v Kondratěvově prostoru $(S)_{-1}$ stochastických distribucí. Tato druhá, novější alternativa (viz Holden a kol. [12]) je vhodná zejména pro úlohy se stochastickými koeficienty, neboť v prostoru $(S)_{-1}$ lze definovat násobení prvků pomocí tzv. Wickova součinu. Prostor $(S)_{-1}$ je analogický klasickému prostoru temperovaných distribucí S' se záměnou testovacích funkcí za hladké náhodné proměnné.

K řešení SDR se pak používá metoda založená na Hermitově transformaci.

Odlišný přístup byl použit při modelování dynamiky konstrukcí — viz např. články Natke, Zamirowski [17]. Příslušné systémy obyčejných diferenciálních rovnic byly aproximovány diferenční metodou a podrobeny hlubší analýze s přihlédnutím k statistickým vlastnostem a k náhodným chybám měření. Důraz se však klade na identifikaci fyzikálních parametrů.

2. Metoda spolehlivého řešení (nejhoršího scénáře)

Deterministický charakter má druhý přístup, který byl nazván metodou spolehlivého řešení, resp. metodou nejhoršího scénáře (viz Hlaváček [3–7], Chleboun [13, 14], Hlaváček, Chleboun [11]). Tato metoda je aplikovatelná na široké spektrum úloh, a to i tam, kde dosud stochastický přístup nebyl ani ustaven, ani prozkoumán. Vznikla původně z podnětu profesora Ivo Babušky v r. 1995.

Hlavní kroky této metody ukážeme nejprve na *příkladě* kvazilineární eliptické okrajové úlohy v omezené oblasti $\varOmega \subset \mathbb{R}^d$

$$-\operatorname{div}\big(a(u)\operatorname{grad} u\big) = f, \qquad u = 0 \quad \text{na hranici } \ \partial\varOmega. \tag{2.1}$$

Nechť (skalární) funkce $a(\cdot)$ je nejistý koeficient, o němž budeme předpokládat pouze to, že patří do jisté dané množiny U_{ad} přípustných funkcí ($ad \equiv$ admissible). Úloha popisuje např. ustálené vedení tepla, funkce $a(\cdot)$ je vodivost, u teplota.

Nechť pro každou funkci $a \in U_{ad}$ existuje jediné řešení $u(a)$ „stavové" úlohy (2.1) v nějakém funkcionálním prostoru V. (To lze dokázat za poměrně slabých předpokladů — viz [5]). Zvolíme kritérium, tj. funkcionál $\varPhi(v) : V \to \mathbb{R}$, např. střední hodnotu funkce na vybrané podoblasti $G \subset \varOmega$ (resp. $G \subset \partial\varOmega$). (Hledáme totiž kritickou, tj. maximální teplotu v daném tělese.)

Řešme maximalizační úlohu: najít

$$a^0 = \arg\max_{a \in U_{ad}} \Phi\bigl(u(a)\bigr). \tag{2.2}$$

Zobecněním je *obecný postup* pro daný stavový problém $P(A)$.

Zvolíme množinu přípustných dat U_{ad}.

Definice množiny U_{ad} je důsledkem konkrétních experimentálních měření a příslušné inverzní-identifikační úlohy.

Předpokládáme, že pro každý prvek $A \in U_{ad}$ existuje právě jedno řešení $u(A)$ problému $P(A)$ z prostoru V.

Zvolíme kritérium (funkcionál)

$$\Phi(A, v) : U_{ad} \times V \to \mathbb{R}.$$

Volba kritéria Φ ovšem vyplývá z charakteru stavové úlohy a odpovídá základnímu cíli výpočtů, tj. přání zadavatele-technika, přírodovědce apod.

Řešíme maximalizační problém

$$A^0 = \arg\max_{A \in U_{ad}} \Phi\bigl(A, u(A)\bigr). \tag{2.3}$$

Postačující podmínky k řešitelnosti problému (2.3) jsou uvedeny v [4], spolu s návrhem přibližného řešení a studiem konvergence.

Příklady aplikace metody spolehlivého řešení:

(1) kvazilineární eliptická okrajová úloha [4], [5], [13], [14] s nejistými koeficienty v rovnici a okrajové podmínce;

(2) lineární parabolický problém s nejistými koeficienty závislými na čase [10];

(3) deformační teorie plasticity (tj. fyzikálně nelineární teorie pružnosti, monotónní potenciální operátor) s nejistou materiálovou funkcí [6];

(4) vlastní frekvence ohybových kmitů Timoshenkova-Mindlinova pružného nosníku s nejistým koeficientem „smykové korekce“ [11];

(5) Signoriniova úloha jednostranného kontaktu pružného tělesa s daným třením, s nejistými Lamého koeficienty, objemovými silami a mezí tření [8];

(6) torze pružně-plastické tyče (podle principu Haara-Kármána) s nejistými koeficienty zobecněného Hookeova zákona [9];

(7) ohyb pružně-plastického nosníku Timoshenkova-Mindlinova typu (analogie principu Haara-Kármána) s nejistou funkcí plasticity [7].

Stavový problém $P(A)$ je zde formulován ve tvaru parciálních diferenciálních rovnic — (1), (2), (3), problému vlastního čísla pro systém dvou obyčejných diferenciálních rovnic — (4) a eliptických variačních nerovnic — (5), (6), (7).

Ve všech případech se dokazuje především existence řešení maximalizační úlohy (2.3). (Upozorňujeme, že jednoznačnost nelze obecně očekávat.)

V článcích [7, 11] je možno stavovou úlohu řešit „přesně“, tj. bez nasazení přibližných metod. V ostatních článcích se aproximují jak stavový problém $P(A)$ (aproximační parametr h), tak množina přípustných dat U_{ad} (aproximační parametr M), a to pomocí metody konečných prvků, resp. splajnů. Tak vzniká přibližný maximalizační problém. Dokazuje se řešitelnost tohoto problému a vztah jeho řešení A^0_{hM} k řešení původního problému (2.3), kdy zjemňujeme aproximační parametry ($h \to 0$, $M \to \infty$). Výsledkem je konvergenční věta: za jistých předpokladů existuje konvergentní posloupnost aproximací $\{A^0_{hM}\}$, $h \to 0+$, $M \to \infty$, taková, že její limita představuje řešení A^0 maximalizačního problému (2.3) a zároveň platí

$$\lim_{\substack{h\to 0\\ M\to\infty}} \Phi\big(A^0_{hM}, u_h(A^0_{hM})\big) = \Phi\big(A^0, u(A^0)\big). \tag{2.4}$$

Zde jsme označili $u_h(A^0_{hM})$ přibližné řešení stavového problému pro vstupní data A^0_{hM}. Z praktického hlediska tvoří limita (2.4) hlavní a kýžený výsledek, zatímco „nejhorší“ data A^0 nejsou tak důležitá.

Výhody metody spolehlivého řešení:

I. K řešení maximalizační úlohy lze použít známé metody a algoritmy z *teorie optimálního navrhování* (Optimal Design). Vskutku, struktura problému (2.3) se po formální stránce neliší od struktury úloh optimálního návrhu (viz např. knihy Haug, Arora [2], Haug, Choi, Komkov [3], Litvinov [16] aj.). Tato poměrně nová matematická disciplína vznikla jako odnož teorie optimálního řízení (Optimal Control) z podnětů a požadavků technické praxe. Proto je k dispozici bohatý aparát nelineárního programování i obecná teorie o analýze citlivosti, tj. o efektivních metodách výpočtu gradientu funkcionálu $\Phi\big(A, u(A)\big)$ vzhledem k proměnné A (viz články [13], [14]).

II. Metoda MSŘ má v podstatě téměř neomezenou *aplikovatelnost*. Lze ji totiž použít např. na všechny modely, které popisují realitu prostředky matematické analýzy jako korektní stavovou úlohu.

   V mnoha případech však lze řešení, tj. „nejhorší scénář“, předvídat. Jednoduchý příklad: ohyb pružného nosníku s nejistým rovnoměrným zatížením. Stavový problém je dán okrajovou úlohou

$$\begin{aligned} EI\,\frac{\mathrm{d}^4u}{\mathrm{d}x^4} &= f, \qquad x \in [0,\ell],\\ u = \frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}x^2} &= 0 \qquad \text{pro} \quad x=0,\ x=\ell, \end{aligned}$$

   kde E, I jsou kladné pevně dané konstanty, zatímco f je nejistá konstanta,

$$0 < f_{\min} \leqq f \leqq f_{\max}; \quad (U_{ad} = [f_{\min}, f_{\max}]).$$

   Nechť kritériem je průhyb uprostřed nosníku, tedy volíme

$$\Phi\big(f, u(f)\big) = u(f)|_{x=\ell/2}.$$

Řešením maximalizační úlohy je zřejmě $f_{\max}$, neboť řešení stavové úlohy je úměrné parametru f.

Význam MSŘ tedy vynikne především v situacích, kdy charakter zobrazení

$$A \mapsto \Phi\bigl(A, u(A)\bigr)$$

lze těžko předvídat. To se týká zejména nelineárních problémů.

III. Metodu MSŘ lze aplikovat, i když stavový problém $P(A)$ *nemá jediné řešení.* Vskutku, nechť $K(A)$ je množina všech řešení příslušných datu $A \in U_{ad}$. Pak místo úlohy (2.3) řešíme modifikovaný maximalizační problém

$$A^0 = \arg\max_{A \in U_{ad}} \bigl(\max_{u \in K(A)} \Phi(A, u) \bigr).$$

Podobně formulujeme aproximační úlohu v případě, že aproximace stavového problému je víceznačně řešitelná (viz článek [5]).

L i t e r a t u r a

[1] Friedman, A.: *Stochastic Differential Equations and Applications, Vols. I, II.* Academic Press 1976.

[2] Haug, E. J., Arora, J. S.: *Applied Optimal Design.* J. Wiley, New York 1979. (Ruský překlad Mir, Moskva 1983.)

[3] Haug, E. J., Choi, K. K., Komkov, V.: *Design Sensitivity Analysis of Structural Systems.* Academic Press, Orlando 1986. (Ruský překlad: Mir, Moskva 1988.)

[4] Hlaváček, I: *Reliable solution of elliptic boundary value problems with respect to uncertain data.* Nonlinear Analysis. Theory, Meth. & Appls. *30* (1997), 3879–3890. Proc. 2nd World Congress of Nonl. Analysts.

[5] Hlaváček, I.: *Reliable solution of a quasilinear nonpotential elliptic problem of a nonmonotone type with respect to the uncertainty in coefficients.* J. Math. Anal. Appl. *212* (1997), 452–466.

[6] Hlaváček, I.: *Reliable solution of problems in the deformation theory of plasticity with respect to uncertain material function.* Appl. Math. *41* (1996), 447–466.

[7] Hlaváček, I.: *Reliable solution of an elasto-plastic Reissner-Mindlin beam for the Hencky's model with uncertain yield function.* Appl. Math. *43* (1998), 223–237.

[8] Hlaváček, I.: *Reliable solution of a unilateral contact problem with friction, considering uncertain data.* Numer. Lin. Algebra w. Appls. (V tisku.)

[9] Hlaváček, I.: *Reliable solution of an elasto-plastic torsion problem.* J. Math. Anal. Appl. (V redakčním řízení.)

[10] Hlaváček, I.: *Reliable solution of linear parabolic problems with uncertain coefficients.* Z. angew. Math. Mech. *79* (1999), 291–301.

[11] Hlaváček, I., Chleboun, J.: *Reliable analysis of transverse vibrations of Timoshenko-Mindlin beams with respect to uncertain shear correction factor.* (V redakčním řízení.)

[12] Holden, H., Øksendal, B., Ubøe, J., Zhang, T.: *Stochastic Partial Differential Equations.* Birkhäuser; Boston, Basel, Berlin 1996.

[13] Chleboun, J.: *Reliable solution for 1D quasilinear elliptic equation with uncertain coefficients.* Zasláno do J. Math. Anal. Appl.

[14] Chleboun, J.: *On a reliable solution of a quasilinear elliptic equation with uncertain coefficients: sensitivity analysis and numerical examples.* (Připraveno k tisku.)

[15] IKEDA, N., WATANABE, S.: *Stochastic Differential Equations and Diffusion Processes (2nd edition).* North-Holland/Kodansha 1989.

[16] LITVINOV, V. G.: *Optimizacija v eliptičeskich krajevych zadačach s primeněnijami k mechanike.* Nauka, Moskva 1987.

[17] NATKE, H. G., ZAMIROWSKI, M.: *ARMAX Modelling in Structural Dynamics.* Z. angew. Math. Mech. *72* (1992), 631–637; *73* (1993), 217–221.

[18] NEDOMA, J.: *Inaccurate linear equation system with a restricted-rank error matrix.* Linear and Multilinear Algebra *44* (1998), 29–44.

[19] ROHN, J.: *Positive definiteness and stability of interval matrices.* SIAM J. Matrix Anal. Appl. *15* (1994), 175–184.

[20] WALSH, J. B.: *An introduction to stochastic partial differential equations.* In: CARMONA, R., KESTEN, H., WALSH, J. B. (ed.), École d'Été de Probabilité de Saint Flour XIV-1984. Springer LNM 1180, str. 265–437.

Nízkoteplotní jaderná orientace — metoda studia magnetických vlastností pevných látek

Štěpán Hubálovský, Praha

Úvod

V tomto článku se pokusíme čtenáři přiblížit jednu z metod studia vlastností látek — nízkoteplotní jadernou orientaci. Základem této metody, jak uvidíme dále, jsou interakce elektrických a magnetických momentů atomových jader s elektromagnetickým polem, které je obklopuje. Jak je již z názvu zřejmé, tato metoda využívá znalostí z oblastí jaderné a atomové fyziky, fyziky nízkých teplot a fyziky kondenzovaného stavu a přináší rovněž nové poznatky do těchto oborů.

V našem příspěvku se kromě objasnění principů této metody zaměříme na její využití při studiu vnitřního, především magnetického uspořádání pevné látky. Zmíníme se i o měření teploty v oblasti milikelvinové pomocí jaderného orientačního teploměru.

Mgr. ŠTĚPÁN HUBÁLOVSKÝ (1970), doktorand na katedře fyziky nízkých teplot MFF UK, V Holešovičkách 2, 180 00 Praha 8, e-mail: `hubalov@hp03.troja.mff.cuni.cz`