

Editor: Jiří V. Horák • Technical Editor: Miloslav Závodný

OBSAH — CONTENTS

Jitka MACHALOVÁ, Pavel ŽENČÁK, Radek KUČERA: Vychýlenost odhadů	L
v modelech s podmínkou	4
Horymír NETUKA, Jiří V. HORÁK: Soustava nosník-pružiny-podloží po)
dvou letech	18
Dušan BEDNAŘÍK, Karel PASTOR: O jedné třídě nehladkých funkcí	43



Metody vnitřních bodů pro řešení úlohy nelineárního programování

JITKA MACHALOVÁ¹, PAVEL ŽENČÁK¹, RADEK KUČERA²

¹Katedra matematické analýzy a aplikací matematiky Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého Tomkova 40, 779 00 Olomouc, Česká republika e-mail: machalova@inf.upol.cz; zencak@inf.upol.cz
²Katedra matematiky a deskriptivní geometrie, VŠB-TU Ostrava, Czech Republic e-mail: Radek.Kucera@vsb.cz

Abstrakt

V tomto článku se zabýváme aplikací metod vnitřních bodů na speciální úlohu nelineárního programování a jejich vzájemným porovnáním. Jako referenční metoda je použita metoda aktivních množin, konkrétně QPC algoritmus popsaný v [2] a [3]. Zaměříme se zejména na metodu sledování cesty a Mehrotrovu metodu prediktor-korektor. Metody jsou porovnány z hlediska výpočetního času a počtu iterací v Matlabu.

Klíčová slova: Primárně-duální metody vnitřních bodů; metoda sledování cesty; Mehrotrova metoda prediktor-korektor.

1991 Mathematics Subject Classification: 90C25, 90C51, 49M29

1 Úvod

Historie metod vnitřních bodů se začala odvíjet zhruba od roku 1980, kdy se začaly velké úlohy lineárního programování řešit jako úlohy nelineární.

Motivací bylo zjištění, že simlexová metoda může v některých úlohách dosahovat až exponenciální složitosti, přestože pro většinu praktických úloh počet iterací nepřevyšuje dvoj až trojnásobek počtu omezení. Proto bylo snahou najít metody s polynomiální složitostí. První takovou metodou byla Chačijanova elipsoidová metoda, nicméně tato metoda nemůže v praktických úlohách konkurovat simplexové metodě. Průlomem se stala až Karmakarova projektivní metoda vnitřních bodů založená na primární formulaci. Tato metoda byla základem vzniku dalších metod vnitřních bodů např. "affine-scaling" metoda, metoda "logaritmických bariér", metoda "redukce potenciálu" a metoda "sledování cesty". Existují různé varianty těchto metod v závislosti na tom, zda jsou založeny na primární, duální nebo primárně-duální formulaci problému. Kolem roku 1990 se ukázalo, že nejefektivnějším praktickým přístupem jsou primárně duální metody, které byly silným konkurentem simlexové metodě ve velkých úlohách.

Metody vnitřních bodů se v úlohách nelineárního programování používaly již v šedesátých letech například v podobě bariérových metod. Ovšem v sedmdesátých letech byly nahrazeny efektivnějšími metodami, např. sekvenciálním kvadratickým programováním. Brzy po objevení Karmakarovy projektivní metody se ukázala její spřízněnost s dříve používanými metodami tohoto typu. To vedlo k oživení zájmu o tyto metody i v nelineárním programování.

V našem příspěvku se budeme zabývat speciální úlohou nelineárního programování. Budeme vycházet z popisu metod vnitřních bodů pro lineární a kvadratické programování uvedených v knize [1].

Nechť je pro $n_i \in \mathbb{N}, i = 1, 2, 3, 4$ takové, že $n_2 = n_3$ a $\sum_{i=1}^4 n_i = n$, dána matice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ a vektor $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ takové, že

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{11} \ \mathbf{A}_{12} \ \mathbf{A}_{13} \ \mathbf{A}_{14} \\ \mathbf{A}_{21} \ \mathbf{A}_{22} \ \mathbf{A}_{23} \ \mathbf{A}_{24} \\ \mathbf{A}_{31} \ \mathbf{A}_{32} \ \mathbf{A}_{33} \ \mathbf{A}_{34} \\ \mathbf{A}_{41} \ \mathbf{A}_{42} \ \mathbf{A}_{43} \ \mathbf{A}_{44} \end{pmatrix} \qquad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \\ \mathbf{b}_3 \\ \mathbf{b}_4 \end{pmatrix}$$

kde $\mathbf{A}_{\mathbf{i},\mathbf{j}} \in \mathbb{R}^{n_i \times n_j}$ a $\mathbf{b}_{\mathbf{i}} \in \mathbb{R}^{n_i}$ pro $i, j \in \{1, 2, 3, 4\}$. Dále nechť je dán vektor $\mathbf{l} \in \mathbb{R}^{n_1}, \mathbf{l} = (l_1, l_2, \dots, l_{n_1})^{\mathrm{T}}$ a vektor $\mathbf{g} \in \mathbb{R}^{n_2}, \mathbf{g} = (g_1, g_2, \dots, g_{n_2})^{\mathrm{T}}$. Označme $\mathcal{N}_i = \{1, 2, \dots, n_i\}$ pro $i \in \{1, 2\}$. Dále předpokládáme, že matice \mathbf{A} je symetrická a pozitivně definitní.

Naším cílem je najít řešení úlohy:

minimalizovat
$$\frac{1}{2}\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{b}$$
 (1a)

- za podmínek $\overline{x_{2i}}^2 + x_{3i}^2 \le g_i^2$ pro $i \in \mathcal{N}_2$ (1b)
 - $x_{1i} \ge l_i$ pro $i \in \mathcal{N}_1$ (1c)

kde vektor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ je tvaru

$$\mathbf{x} = \left(\mathbf{x}_{1}^{\mathrm{T}}, \mathbf{x}_{2}^{\mathrm{T}}, \mathbf{x}_{3}^{\mathrm{T}}, \mathbf{x}_{4}^{\mathrm{T}}
ight)^{\mathrm{T}}$$

přičemž $\mathbf{x}_{\mathbf{i}} = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{in_i})^{\mathrm{T}}$ pro $i \in \{1, 2, 3, 4\}$.

Pro usnadnění dalších zápisů označíme symbolem \odot Hadamardův součin $\mathbf{w} = \mathbf{u} \odot \mathbf{v}$ vektorů $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^m$, $\mathbf{u} = (u_1, u_2, \dots, u_m)^{\mathrm{T}}$, $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^m$, $\mathbf{v} = (v_1, v_2, \dots, v_m)^{\mathrm{T}}$, definovaný vztahem $w_i = u_i v_i$ pro $i \in \{1, \dots, m\}$, tedy $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^m$.

Úlohu (1) pak můžeme přepsat ve tvaru:

minimalizovat
$$\frac{1}{2}\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{b}$$
 (2a)

za podmínek $\mathbf{x}_2 \odot \mathbf{x}_2 + \mathbf{x}_3 \odot \mathbf{x}_3 \le \mathbf{g} \odot \mathbf{g}$ (2b)

$$\mathbf{x}_1 \ge \mathbf{l} \tag{2c}$$

Je snadné ověřit, že je-li matice **A** pozitivně semidefinitní, jedná se o úlohu konvexního programování, což nám zaručuje existenci řešení. Je-li matice **A** pozitivně definitní má úloha právě jedno řešení.

2 Popis primárně duálních metod

V tomto odstavci nejprve popíšeme Karush–Kuhn–Tuckerovy (KKT) podmínky úlohy. Základní schéma metod vnitřních bodů získáme aplikací Newtonovy metody na KKT podmínky a jeho jednoduchou úpravou dostaneme metodu nevyžadující znalost počátečního přípustného bodu. Dále pro naši úlohu odvodíme výpočetně efektivnější metody vycházející z tohoto základního schématu, a to metodu sledování cesty a Mehrotrovu metodu typu prediktor-korektor.

2.1 Karush–Kuhn–Tuckerovy podmínky

Při odvození Karush–Kuhn–Tuckerových podmínek vyjdeme z Lagrangeovy funkce

$$\mathcal{L}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) := \frac{1}{2} \mathbf{x}^{\mathrm{T}} \mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{x}^{\mathrm{T}} \mathbf{b} + \boldsymbol{\mu}^{\mathrm{T}} (\mathbf{x}_{2} \odot \mathbf{x}_{2} + \mathbf{x}_{3} \odot \mathbf{x}_{3} - \mathbf{g} \odot \mathbf{g}) + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}} (\mathbf{l} - \mathbf{x}_{1})$$
(3)

kde $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{n_1})^{\mathrm{T}}$ a $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{n_2})^{\mathrm{T}}$ jsou nezáporné vektory Lagrangeových multiplikátorů. Karush-Kuhn-Tuckerovy podmínky pak lze zapsat ve tvaru

$$A_{11}x_1 + A_{12}x_2 + A_{13}x_3 + A_{14}x_4 - \lambda - b_1 = 0$$
 (4a)

$$\mathbf{A}_{21}\mathbf{x}_1 + \mathbf{A}_{22}\mathbf{x}_2 + \mathbf{A}_{23}\mathbf{x}_3 + \mathbf{A}_{24}\mathbf{x}_4 + 2\boldsymbol{\mu} \odot \mathbf{x}_2 - \mathbf{b}_2 = \mathbf{0}$$
(4b)

$$\mathbf{A}_{31}\mathbf{x}_{1} + \mathbf{A}_{32}\mathbf{x}_{2} + \mathbf{A}_{33}\mathbf{x}_{3} + \mathbf{A}_{34}\mathbf{x}_{4} + 2\boldsymbol{\mu} \odot \mathbf{x}_{2} - \mathbf{b}_{2} = \mathbf{0}$$
(4c)
$$\mathbf{A}_{41}\mathbf{x}_{1} + \mathbf{A}_{42}\mathbf{x}_{2} + \mathbf{A}_{43}\mathbf{x}_{4} + 2\boldsymbol{\mu} \odot \mathbf{x}_{3} - \mathbf{b}_{3} = \mathbf{0}$$
(4c)
$$\mathbf{A}_{41}\mathbf{x}_{1} + \mathbf{A}_{42}\mathbf{x}_{2} + \mathbf{A}_{42}\mathbf{x}_{3} + \mathbf{A}_{44}\mathbf{x}_{4} - \mathbf{b}_{4} = \mathbf{0}$$
(4d)

$$A_{41}x_1 + A_{42}x_2 + A_{43}x_3 + A_{44}x_4 - b_4 = 0$$
(4d)

$$\mathbf{l} - \mathbf{x}_1 \le \mathbf{0} \tag{4e}$$

$$\boldsymbol{\lambda} \odot (\mathbf{l} - \mathbf{x}_1) = \mathbf{0} \tag{4f}$$

$$\boldsymbol{\lambda} \odot (\mathbf{l} - \mathbf{x}_1) = \mathbf{0} \tag{4f}$$

$$\mathbf{x}_2 \odot \mathbf{x}_2 + \mathbf{x}_3 \odot \mathbf{x}_3 - \mathbf{g} \odot \mathbf{g} \le \mathbf{0} \tag{4g}$$

$$\boldsymbol{\mu} \odot (\mathbf{x}_2 \odot \mathbf{x}_2 + \mathbf{x}_3 \odot \mathbf{x}_3 - \mathbf{g} \odot \mathbf{g}) = \mathbf{0}$$
(4h)

 $\mu \ge 0$ $\lambda \ge 0$ (4i)

Zavedeme-li doplňkové proměnné $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^{n_2}$, $\mathbf{d} = (d_1, d_2, \dots, d_{n_2})^{\mathrm{T}}$, $\mathbf{s} \in \mathbb{R}^{n_1}$, $\mathbf{s} = (s_1, s_2, \dots, s_{n_1})^{\mathrm{T}}$ a použijeme-li označení

 $\mathbf{e}_{i} = (1, 1, \dots, 1)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^{n_{i}} \text{ pro } i = 1, 2$ $\mathbf{\Lambda} = \operatorname{diag}(\lambda_{1}, \lambda_{2}, \dots, \lambda_{n_{1}})$ $\mathbf{M} = \operatorname{diag}(\mu_{1}, \mu_{2}, \dots, \mu_{n_{2}})$ $\mathbf{S} = \operatorname{diag}(s_{1}, s_{2}, \dots, s_{n_{1}})$ $\mathbf{D} = \operatorname{diag}(d_{1}, d_{2}, \dots, d_{n_{2}})$

lze KKT podmínky zapsat takto:

$$A_{11}x_1 + A_{12}x_2 + A_{13}x_3 + A_{14}x_4 - \lambda - b_1 = 0$$
 (5a)

$$A_{21}x_1 + (A_{22} + 2M)x_2 + A_{23}x_2 + A_{24}x_4 - b_2 = 0$$
 (5b)

$$A_{31}x_1 + A_{32}x_2 + (A_{33} + 2M)x_3 + A_{34}x_4 - b_3 = 0$$
 (5c)

$$\mathbf{A}_{41}\mathbf{x}_1 + \mathbf{A}_{42}\mathbf{x}_2 + \mathbf{A}_{43}\mathbf{x}_3 + \mathbf{A}_{44}\mathbf{x}_4 - \mathbf{b}_4 = \mathbf{0}$$
(5d)

$$-\mathbf{x}_1 + \mathbf{s} + \mathbf{l} = \mathbf{0} \tag{5e}$$

$$\mathbf{\Lambda Se}_1 = \mathbf{0} \tag{5f}$$

$$\mathbf{x}_2 \odot \mathbf{x}_2 + \mathbf{x}_3 \odot \mathbf{x}_3 - \mathbf{g} \odot \mathbf{g} + \mathbf{d} = \mathbf{0}$$
 (5g)

 $\mathbf{MDe}_2 = \mathbf{0} \tag{5h}$

$$\mu \ge 0$$
 $\lambda \ge 0$ $\mathbf{s} \ge 0$ $\mathbf{d} \ge 0$ (5i)

2.2 Základní schéma primárně duálních metod

Při řešení dané úlohy tedy hledáme řešení soustavy KKT podmínek (5a) až (5i), tj. hledáme řešení soustavy nelineárních rovnic

$$F(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{s}, \boldsymbol{\mu}, \mathbf{d}) = \mathbf{0}$$
 za podmínek $\boldsymbol{\lambda} \ge \mathbf{0}, \ \mathbf{s} \ge \mathbf{0}, \ \boldsymbol{\mu} \ge \mathbf{0}, \ \mathbf{d} \ge \mathbf{0}$ (6)

kde

$$F(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{s}, \boldsymbol{\mu}, \mathbf{d}) = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{11}\mathbf{x}_1 + \mathbf{A}_{12}\mathbf{x}_2 + \mathbf{A}_{13}\mathbf{x}_3 - \boldsymbol{\lambda} - \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{A}_{21}\mathbf{x}_1 + (\mathbf{A}_{22} + 2\mathbf{M})\mathbf{x}_2 + \mathbf{A}_{23}\mathbf{x}_3 - \mathbf{b}_2 \\ \mathbf{A}_{31}\mathbf{x}_1 + \mathbf{A}_{32}\mathbf{x}_2 + (\mathbf{A}_{33} + 2\mathbf{M})\mathbf{x}_3 - \mathbf{b}_3 \\ \mathbf{A}_{41}\mathbf{x}_1 + \mathbf{A}_{42}\mathbf{x}_2 + \mathbf{A}_{43}\mathbf{x}_3 + \mathbf{A}_{44}\mathbf{x}_4 - \mathbf{b}_4 \\ -\mathbf{x}_1 + \mathbf{s} + \mathbf{l} \\ \mathbf{\Lambda}\mathbf{Se}_1 \\ \mathbf{x}_2 \odot \mathbf{x}_2 + \mathbf{x}_3 \odot \mathbf{x}_3 - \mathbf{g} \odot \mathbf{g} + \mathbf{d} \\ \mathbf{MDe}_2 \end{pmatrix}$$

Označme $\mathbf{X}_i = \text{diag}(\mathbf{x}_i^{\mathrm{T}})$ pro $i \in \{1, 2, 3, 4\}$, pak Jakobián funkce $F(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{s}, \boldsymbol{\mu}, \mathbf{d})$ je ve tvaru

$$J(\mathbf{x}_{1}, \mathbf{x}_{2}, \mathbf{x}_{3}, \mathbf{x}_{4}, \lambda, \mathbf{s}, \mu, \mathbf{d}) = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} & \mathbf{A}_{13} & \mathbf{A}_{14} - \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} + 2\mathbf{M} & \mathbf{A}_{23} & \mathbf{A}_{24} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & 2\mathbf{X}_{2} & \mathbf{0} \\ \mathbf{A}_{31} & \mathbf{A}_{32} & \mathbf{A}_{33} + 2\mathbf{M} & \mathbf{A}_{34} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & 2\mathbf{X}_{3} & \mathbf{0} \\ \mathbf{A}_{41} & \mathbf{A}_{42} & \mathbf{A}_{43} & \mathbf{A}_{44} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ -\mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{S} & \mathbf{\Lambda} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I} & \mathbf{I} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I} & \mathbf{M} \end{pmatrix}$$
(7)

Dále označme

 $\mathcal{F} = \{ (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{s}, \boldsymbol{\mu}, \mathbf{d}) \in \mathbb{R}^m \mid \text{platí KKT podmínky (5a)-(5e), (5g), (5i)} \}$ množinu přípustných řešení naší úlohy, množinu striktně přípustných řešení označíme

$$\mathcal{F}^0 = \{(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{s}, \boldsymbol{\mu}, \mathbf{d}) \in \mathcal{F} \mid \boldsymbol{\lambda} > \mathbf{0}, \mathbf{s} > \mathbf{0}, \boldsymbol{\mu} > \mathbf{0}, \mathbf{d} > \mathbf{0}\},$$

kde $m = n + 2n_1 + 2n_2$. Pak rovnici (6) řešíme modifikovanou Newtonovou metodou zachovávající omezení, tj. novou iteraci $(\bar{\mathbf{x}}_1, \bar{\mathbf{x}}_2, \bar{\mathbf{x}}_3, \bar{\mathbf{x}}_4, \bar{\boldsymbol{\lambda}}, \bar{\mathbf{s}}, \bar{\boldsymbol{\mu}}, \bar{\mathbf{d}})$ počítáme podle vzorce

$$\begin{aligned} (\bar{\mathbf{x}}_1, \bar{\mathbf{x}}_2, \bar{\mathbf{x}}_3, \bar{\mathbf{x}}_4, \bar{\boldsymbol{\lambda}}, \bar{\mathbf{s}}, \bar{\boldsymbol{\mu}}, \bar{\mathbf{d}}) &= (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{s}, \boldsymbol{\mu}, \mathbf{d}) + \\ &+ \delta(\Delta \mathbf{x}_1, \Delta \mathbf{x}_2, \Delta \mathbf{x}_3, \Delta \mathbf{x}_4, \Delta \boldsymbol{\lambda}, \Delta \mathbf{s}, \Delta \boldsymbol{\mu}, \Delta \mathbf{d}) \end{aligned}$$

kde vektor $(\Delta \mathbf{x}_1, \Delta \mathbf{x}_2, \Delta \mathbf{x}_3, \Delta \mathbf{x}_4, \Delta \boldsymbol{\lambda}, \Delta \mathbf{s}, \Delta \boldsymbol{\mu}, \Delta \mathbf{d})$ je řešením soustavy lineárních rovnic

$$J(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{s}, \boldsymbol{\mu}, \mathbf{d}) \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{x}_1 \\ \Delta \mathbf{x}_2 \\ \Delta \mathbf{x}_3 \\ \Delta \mathbf{x}_4 \\ \Delta \boldsymbol{\lambda} \\ \Delta \mathbf{s} \\ \Delta \boldsymbol{\mu} \\ \Delta \mathbf{d} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ -\mathbf{\Lambda} \mathbf{S} \mathbf{e}_1 \\ \mathbf{0} \\ -\mathbf{\Lambda} \mathbf{S} \mathbf{e}_1 \\ \mathbf{0} \\ -\mathbf{M} \mathbf{D} \mathbf{e}_2 \end{pmatrix}$$

a krok δ určíme tak, aby platilo $(\bar{\mathbf{x}}_1, \bar{\mathbf{x}}_2, \bar{\mathbf{x}}_3, \bar{\mathbf{x}}_4, \bar{\boldsymbol{\lambda}}, \bar{\mathbf{s}}, \bar{\boldsymbol{\mu}}, \bar{\mathbf{d}}) \in \mathcal{F}^0.$

Jednou z nevýhod předchozího postupu je to, že je obtížné určit počáteční řešení vyhovující KKT podmínkám. Proto se používají metody, které nevyžadují, aby počáteční řešení bylo přípustné. Tyto metody vzniknou snadnou úpravou (přidáním residuí) předchozího postupu.

Označme

$$\mathcal{F}_N^0 = \{(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{s}, \boldsymbol{\mu}, \mathbf{d}) \in \mathbb{R}^m \mid \boldsymbol{\lambda} > \mathbf{0}, \mathbf{s} > \mathbf{0}, \boldsymbol{\mu} > \mathbf{0}, \mathbf{d} > \mathbf{0}\}.$$

Pak rovnici (6) řešíme modifikovanou Newtonovou metodou zachovávající omezení, tj. novou iteraci $(\bar{\mathbf{x}}_1, \bar{\mathbf{x}}_2, \bar{\mathbf{x}}_3, \bar{\mathbf{x}}_4, \bar{\boldsymbol{\lambda}}, \bar{\mathbf{s}}, \bar{\boldsymbol{\mu}}, \bar{\mathbf{d}})$ počítáme podle vzorce

$$egin{aligned} & (ar{\mathbf{x}}_1, ar{\mathbf{x}}_2, ar{\mathbf{x}}_3, ar{\mathbf{x}}_4, ar{m{\lambda}}, ar{\mathbf{s}}, ar{m{\mu}}, ar{\mathbf{d}}) = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4, m{\lambda}, \mathbf{s}, m{\mu}, m{d}) + \ & + \delta(\Delta \mathbf{x}_1, \Delta \mathbf{x}_2, \Delta \mathbf{x}_3, \Delta \mathbf{x}_4, \Delta m{\lambda}, \Delta \mathbf{s}, \Delta m{\mu}, \Delta m{d}), \end{aligned}$$

kde vektor $(\Delta \mathbf{x}_1, \Delta \mathbf{x}_2, \Delta \mathbf{x}_3, \Delta \mathbf{x}_4, \Delta \boldsymbol{\lambda}, \Delta \mathbf{s}, \Delta \boldsymbol{\mu}, \Delta \mathbf{d})$ je řešením soustavy lineárních rovnic

$$J(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{s}, \boldsymbol{\mu}, \mathbf{d}) \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{x}_1 \\ \Delta \mathbf{x}_2 \\ \Delta \mathbf{x}_3 \\ \Delta \mathbf{x}_4 \\ \Delta \boldsymbol{\lambda} \\ \Delta \boldsymbol{\lambda} \\ \Delta \boldsymbol{\lambda} \\ \Delta \mathbf{d} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\mathbf{r}_1 \\ -\mathbf{r}_2 \\ -\mathbf{r}_3 \\ -\mathbf{r}_4 \\ \mathbf{x}_1 - \mathbf{l} - \mathbf{s} \\ -\mathbf{\Lambda} \mathbf{S} \mathbf{e}_1 \\ \mathbf{g} \odot \mathbf{g} - \mathbf{x}_2 \odot \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_3 \odot \mathbf{x}_3 - \mathbf{d} \\ -\mathbf{M} \mathbf{D} \mathbf{e}_2 \end{pmatrix}$$

přičemž

$$\begin{pmatrix} \mathbf{r}_1 \\ \mathbf{r}_2 \\ \mathbf{r}_3 \\ \mathbf{r}_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{11} \ \mathbf{A}_{12} \ \mathbf{A}_{13} \ \mathbf{A}_{14} \\ \mathbf{A}_{21} \ \mathbf{A}_{22} \ \mathbf{A}_{23} \ \mathbf{A}_{24} \\ \mathbf{A}_{31} \ \mathbf{A}_{32} \ \mathbf{A}_{33} \ \mathbf{A}_{34} \\ \mathbf{A}_{41} \ \mathbf{A}_{42} \ \mathbf{A}_{43} \ \mathbf{A}_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \\ \mathbf{x}_3 \\ \mathbf{x}_4 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \\ \mathbf{b}_3 \\ \mathbf{b}_4 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \boldsymbol{\lambda} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ 2\mathbf{M}\mathbf{x}_2 \\ 2\mathbf{M}\mathbf{x}_3 \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}$$

a krok δ určíme tak, aby platilo $(\bar{\mathbf{x}}_1, \bar{\mathbf{x}}_2, \bar{\mathbf{x}}_3, \bar{\mathbf{x}}_4, \bar{\boldsymbol{\lambda}}, \bar{\mathbf{s}}, \bar{\boldsymbol{\mu}}, \bar{\mathbf{d}}) \in \mathcal{F}_N^0$.

2.3 Metoda sledování cesty

Další nevýhodou předchozích postupů je to, že při hledání v Newtonově směru je často možné provést jen velmi malý krok, jinak by došlo k narušení podmínek striktní komplementarity. Proto se zavádí tzv. *centrální cesta* a nové řešení se hledá ve směru, který je určen pomocí tzv. *centrovacího parametru* jako kompromis mezi Newtonovým směrem a tzv. *centrujícím směrem*.

Centrální cesta C je definována jako množinu bodů $(\mathbf{x}_1^{\tau}, \mathbf{x}_2^{\tau}, \mathbf{x}_3^{\tau}, \mathbf{x}_4^{\tau}, \boldsymbol{\lambda}^{\tau}, \mathbf{s}^{\tau}, \boldsymbol{\mu}^{\tau}, \mathbf{d}^{\tau})$ řešících pro každou hodnotu parametru $\tau = (\tau_l, \tau_k)^T$ následující soustavu, která vznikne drobnou změnou KKT podmínek:

$$A_{11}x_1 + A_{12}x_2 + A_{13}x_3 + A_{14}x_4 - \lambda - b_1 = 0$$
 (8a)

 $A_{21}x_1 + (A_{22} + 2M)x_2 + A_{23}x_2 + A_{24}x_4 - b_2 = 0$ (8b)

$$A_{31}x_1 + A_{32}x_2 + (A_{33} + 2M)x_3 + A_{34}x_4 - b_3 = 0$$
 (8c)

$$A_{41}x_1 + A_{42}x_2 + A_{43}x_3 + A_{44}x_4 - b_4 = 0$$
 (8d)

$$-\mathbf{x}_1 + \mathbf{s} + \mathbf{l} = \mathbf{0} \tag{8e}$$

$$\mathbf{\Lambda Se}_1 = \tau_l \mathbf{e}_1 \tag{8f}$$

$$\mathbf{x}_2 \odot \mathbf{x}_2 + \mathbf{x}_3 \odot \mathbf{x}_3 - \mathbf{g} \odot \mathbf{g} + \mathbf{d} = \mathbf{0}$$
 (8g)

 $\mathbf{MDe}_2 = \tau_k \mathbf{e}_2 \tag{8h}$

$$\lambda > 0 \quad \mathbf{s} > 0 \quad \mu > 0 \quad \mathbf{d} > 0$$
 (8i)

Dále zavedeme míru duality α v lineárních podmínkách a míru duality β v kvadratických podmínkách, které mají tvar:

$$\alpha = \frac{\boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}} \mathbf{s}}{n_1} \qquad \qquad \beta = \frac{\boldsymbol{\mu}^{\mathrm{T}} \mathbf{d}}{n_2}$$

S jejich pomocí a s pomocí centrujícího parametru $\sigma_l \in [0, 1]$ pro lineární podmínky a centrujícího parametru $\sigma_k \in [0, 1]$ pro kvadratické podmínky pak parametry centrující cesty píšeme jako $\tau_l = \sigma_l \alpha$ a $\tau_k = \sigma_k \beta$.

Novou iteraci $(\bar{\mathbf{x}}_1, \bar{\mathbf{x}}_2, \bar{\mathbf{x}}_3, \bar{\mathbf{x}}_4, \bar{\boldsymbol{\lambda}}, \bar{\mathbf{s}}, \bar{\boldsymbol{\mu}}, \bar{\mathbf{d}})$ počítáme podle vzorce

$$egin{aligned} & (ar{\mathbf{x}}_1, ar{\mathbf{x}}_2, ar{\mathbf{x}}_3, ar{\mathbf{x}}_4, oldsymbol{\lambda}, ar{\mathbf{s}}, oldsymbol{ar{\mu}}, \mathbf{d}) = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4, oldsymbol{\lambda}, \mathbf{s}, oldsymbol{\mu}, \mathbf{d}) + \ & + \delta(\Delta \mathbf{x}_1, \Delta \mathbf{x}_2, \Delta \mathbf{x}_3, \Delta \mathbf{x}_4, \Delta oldsymbol{\lambda}, \Delta \mathbf{s}, \Delta oldsymbol{\mu}, \mathbf{d} \mathbf{d}) \end{aligned}$$

kde vektor $(\Delta \mathbf{x}_1, \Delta \mathbf{x}_2, \Delta \mathbf{x}_3, \Delta \mathbf{x}_4, \Delta \boldsymbol{\lambda}, \Delta \mathbf{s}, \Delta \boldsymbol{\mu}, \Delta \mathbf{d})$ je řešením soustavy lineárních rovnic

$$J(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{s}, \boldsymbol{\mu}, \mathbf{d}) \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{x}_1 \\ \Delta \mathbf{x}_2 \\ \Delta \mathbf{x}_3 \\ \Delta \mathbf{x}_4 \\ \Delta \boldsymbol{\lambda} \\ \Delta \mathbf{s} \\ \Delta \boldsymbol{\mu} \\ \Delta \mathbf{d} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\mathbf{r}_1 \\ -\mathbf{r}_2 \\ -\mathbf{r}_3 \\ -\mathbf{r}_4 \\ \mathbf{x}_1 - \mathbf{l} - \mathbf{s} \\ -\mathbf{\Lambda} \mathbf{S} \mathbf{e}_1 + \sigma_l \alpha \mathbf{e}_1 \\ \mathbf{g} \odot \mathbf{g} - \mathbf{x}_2 \odot \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_3 \odot \mathbf{x}_3 - \mathbf{d} \\ -\mathbf{M} \mathbf{D} \mathbf{e}_2 + \sigma_k \beta \mathbf{e}_2 \end{pmatrix}$$

a krok δ určíme tak, aby platilo $(\bar{\mathbf{x}}_1, \bar{\mathbf{x}}_2, \bar{\mathbf{x}}_3, \bar{\mathbf{x}}_4, \bar{\boldsymbol{\lambda}}, \bar{\mathbf{s}}, \bar{\boldsymbol{\mu}}, \bar{\mathbf{d}}) \in \mathcal{F}_N^0$.

2.4 Mehrotrova metoda typu prediktor-korektor

Jednou z nejpoužívanějších metod v praxi je Mehrotrova metoda typu prediktorkorektor. Tato metoda používá směrový vektor a délku kroku vypočtené z prediktoru k výpočtu odhadu centrujícího parametru pro korektor. Směrový vektor vypočtený v prediktoru je v korektoru také použit k aproximaci cesty vyššího řádu, čímž dojde ke snížení počtu iterací, ovšem za cenu řešení dvou soustav lineárních rovnic v každé iteraci.

Nejprve tedy v prediktoru vypočteme Newtonův směr

$$(\Delta \mathbf{x}_1^{aff}, \Delta \mathbf{x}_2^{aff}, \Delta \mathbf{x}_3^{aff}, \Delta \mathbf{x}_4^{aff}, \Delta \boldsymbol{\lambda}^{aff}, \Delta \mathbf{s}^{aff}, \Delta \boldsymbol{\mu}^{aff}, \Delta \mathbf{d}^{aff})$$

který je řešením soustavy lineárních rovnic

$$J(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{s}, \boldsymbol{\mu}, \mathbf{d}) \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{x}_1^{aff} \\ \Delta \mathbf{x}_2^{aff} \\ \Delta \mathbf{x}_3^{aff} \\ \Delta \mathbf{x}_4^{aff} \\ \Delta \boldsymbol{\lambda}^{aff} \\ \Delta \mathbf{x}_4^{aff} \\ \mathbf{x}_4^{aff} \\$$

Maximální přípustný krok δ^{aff} určíme tak, aby platilo

$$(\mathbf{x}_1^{aff}, \mathbf{x}_2^{aff}, \mathbf{x}_3^{aff}, \mathbf{x}_4^{aff}, oldsymbol{\lambda}^{aff}, \mathbf{s}^{aff}, oldsymbol{\mu}^{aff}, \mathbf{d}^{aff}) \in \mathcal{F}_N^{\mathbf{0}}$$

Dále vypočítáme, jak by se změnily míry duality, pokud bychom provedli krok ve směru vypočteném v prediktoru

$$\alpha_{aff} = \frac{\left(\boldsymbol{\lambda} + \delta^{aff} \Delta \boldsymbol{\lambda}^{aff}\right)^{\mathrm{T}} \left(\mathbf{s} + \delta^{aff} \Delta \mathbf{s}^{aff}\right)}{n_{1}}$$
$$\beta_{aff} = \frac{\left(\boldsymbol{\mu} + \delta^{aff} \Delta \boldsymbol{\mu}^{aff}\right)^{\mathrm{T}} \left(\mathbf{d} + \delta^{aff} \Delta \mathbf{d}^{aff}\right)}{n_{2}}$$

Tyto nové míry duality použijeme k výpočtu odhadu centrujících parametrů

$$\sigma_l = \left(\frac{\alpha_{aff}}{\alpha}\right)^3 \qquad \qquad \sigma_k = \left(\frac{\beta_{aff}}{\beta}\right)^3$$

které následně použijeme v korektoru.

Vektor přírůstků nové iterace $(\Delta \mathbf{x}_1, \Delta \mathbf{x}_2, \Delta \mathbf{x}_3, \Delta \mathbf{x}_4, \Delta \lambda, \Delta \mathbf{s}, \Delta \boldsymbol{\mu}, \Delta \mathbf{d})$ vypočítáme v korektoru jako řešení soustavy lineárních rovnic

$$J(\mathbf{x}_{1}, \mathbf{x}_{2}, \mathbf{x}_{3}, \mathbf{x}_{4}, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{s}, \boldsymbol{\mu}, \mathbf{d}) \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{x}_{1} \\ \Delta \mathbf{x}_{2} \\ \Delta \mathbf{x}_{3} \\ \Delta \mathbf{x}_{3} \\ \Delta \mathbf{x}_{4} \\ \Delta \boldsymbol{\lambda} \\ \Delta \mathbf{s} \\ \Delta \boldsymbol{\mu} \\ \Delta \mathbf{d} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\mathbf{r}_{1} \\ -\mathbf{r}_{2} \\ -\mathbf{r}_{3} \\ -\mathbf{r}_{4} \\ \mathbf{x}_{1} - \mathbf{l} - \mathbf{s} \\ -\mathbf{\Lambda} \mathbf{S} \mathbf{e}_{1} - \Delta \boldsymbol{\lambda}^{aff} \odot \Delta s^{aff} + \sigma_{l} \alpha \mathbf{e}_{1} \\ \mathbf{g} \odot \mathbf{g} - \mathbf{x}_{2} \odot \mathbf{x}_{2} - \mathbf{x}_{3} \odot \mathbf{x}_{3} - \mathbf{d} \\ -\mathbf{M} \mathbf{D} \mathbf{e}_{2} - \Delta \boldsymbol{\mu}^{aff} \odot \Delta \boldsymbol{d}^{aff} + \sigma_{k} \beta \mathbf{e}_{2} \end{pmatrix}$$

a krok δ určíme tak, aby platilo $(\bar{\mathbf{x}}_1, \bar{\mathbf{x}}_2, \bar{\mathbf{x}}_3, \bar{\mathbf{x}}_4, \bar{\mathbf{\lambda}}, \bar{\mathbf{s}}, \bar{\boldsymbol{\mu}}, \bar{\mathbf{d}}) \in \mathcal{F}_N^0$.

3 Realizace metod

Všechny realizované metody vycházejí z počátečného bodu, který nemusí splňovat podmínky přípustnosti. Oproti metodám popsaným v předchozí části se nepracuje přímo s maticí Jakobiánu $J(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4, \mathbf{s}, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{d}, \boldsymbol{\mu})$, ale s tzv. rozšířenou maticí, která vznikne eliminací doplňkových proměnných s a **d** ze soustavy.

3.1 Řešení lineárních soustav

Ze soustav s Jakobiho maticí $J(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{s}, \boldsymbol{\mu}, \mathbf{d})$ vyeliminujeme Δs a Δd a převedeme je na soustavu s tzv. rozšířenou maticí

1	$/ A_{11}$	\mathbf{A}_{12}	\mathbf{A}_{13}	\mathbf{A}_{14}	-I	0	
	\mathbf{A}_{21}	$\mathbf{A}_{22}+2\mathbf{M}$	\mathbf{A}_{23}	\mathbf{A}_{24}	0	$2\mathbf{X}_2$	
	\mathbf{A}_{31}	\mathbf{A}_{32}	$\mathbf{A}_{33}+2\mathbf{M}$	\mathbf{A}_{34}	0	$2\mathbf{X}_3$	
	\mathbf{A}_{14}	\mathbf{A}_{24}	\mathbf{A}_{34}	\mathbf{A}_{44}	0	0	
	$-\mathbf{I}$	0	0	0	$-\mathbf{\Lambda}^{-1}\mathbf{S}$	0	
l	0	$2\mathbf{X}_2$	$2\mathbf{X}_3$	0	0	$-\mathbf{M}^{-1}\mathbf{D}$	

Řešením soustavy pak vypočítáme $\Delta \mathbf{x}_1, \Delta \mathbf{x}_2, \Delta \mathbf{x}_3, \Delta \mathbf{x}_4, \Delta \lambda, \Delta \mu$, zbylé přírůstky Δs a Δd pak dopočítáme z eliminovaných rovnic. V případě Newtonova směru $\Delta \mathbf{s}$ a $\Delta \mathbf{d}$ dopočítáme ze vzorců

$$\Delta \mathbf{s} = -\mathbf{s} - \mathbf{\Lambda}^{-1} \mathbf{S} \Delta \boldsymbol{\lambda}$$

 $\Delta \mathbf{d} = -\mathbf{d} - \mathbf{M}^{-1} \mathbf{D} \Delta \boldsymbol{\mu}$

V metodě sledování cesty použijeme vzorce

$$\Delta \mathbf{s} = -\mathbf{s} - \mathbf{\Lambda}^{-1} \mathbf{S} \Delta \mathbf{\lambda} + \mathbf{\Lambda}^{-1} \sigma_l \alpha \mathbf{e}_1$$

$$\Delta \mathbf{d} = -\mathbf{d} - \mathbf{M}^{-1} \mathbf{D} \Delta \boldsymbol{\mu} + \mathbf{M}^{-1} \sigma_k \beta \mathbf{e}_2.$$

V prediktoru Mehrotrovy metody se použíjí stejné vzorce jako v Newtonově směru, v korektoru počítáme podle

$$\Delta \mathbf{s} = -\mathbf{s} - \mathbf{\Lambda}^{-1} \mathbf{S} \Delta \boldsymbol{\lambda} - \mathbf{\Lambda}^{-1} \Delta \boldsymbol{\lambda}^{aff} \odot \Delta \mathbf{s}^{aff} + \mathbf{\Lambda}^{-1} \sigma_l \alpha \mathbf{e}_1$$

$$\Delta \mathbf{d} = -\mathbf{d} - \mathbf{M}^{-1} \mathbf{D} \Delta \boldsymbol{\mu} - \mathbf{M}^{-1} \Delta \boldsymbol{\mu}^{aff} \odot \Delta \mathbf{d}^{aff} + \mathbf{M}^{-1} \sigma_k \beta \mathbf{e}_2.$$

3.2 Výpočet délky kroku ve všech metodách

Nejdříve vypočítáme maximální možné kroky ve zvoleném směru pro jednotlivé přírůstky:

$$\delta_l^{pri} = \min\left\{1, \min_{\Delta\lambda_i < 0} \frac{-\lambda_i}{\Delta\lambda_i}\right\}$$
(9)

$$\delta_l^{dual} = \min\left(1, \min_{\Delta s_i < 0} \frac{-s_i}{\Delta s_i}\right) \tag{10}$$

$$\delta_k^{pri} = \min\left(1, \min_{\Delta\mu_i < 0} \frac{-\mu_i}{\Delta\mu_i}\right) \tag{11}$$

$$\delta_k^{dual} = \min\left(1, \min_{\Delta d_i < 0} \frac{-d_i}{\Delta d_i}\right) \tag{12}$$

Poté krok δ počítáme jako

$$\delta = \min\left\{\delta_l^{pri}, \delta_l^{dual}, \delta_k^{pri}, \delta_k^{dual}\right\}.$$
(13)

4 Numerické testy

Numerické testování jsme prováděli na úloze

minimalizovat
$$\frac{1}{2} \int_0^1 \| \mathbf{X'}(t) \|^2 dt - \int_0^1 \mathbf{X}(t) \mathbf{F}(t) dt$$

za podmínek $\mathbf{X} = (X_1, X_2)^T \in \mathcal{K}$

kde

$$\mathcal{K} = \{ \boldsymbol{X} \in (H_0^1(0,1))^2 \mid X_2(t) \ge L \text{ na } (0,0.5), \ \|\boldsymbol{X}(t)\| \le G \text{ na } (0.5,1) \}$$
$$\boldsymbol{F}(t) = (36\pi^2 \sin 6\pi t, -4\pi^2 \sin 2\pi t)^T$$

Tato úloha popisuje zatížení struny, která je částečně nad rovinou ve vzdálenosti L a částečně ve válcové trubce o poloměru G. Po diskretizaci metodou konečných prvků na pravidelné síti s n stupni volnosti dostaneme minimalizační úlohu ve tvaru (1), kde $n_1 = n_2 = n/4$ a $l_i = L$ a $g_i = G$.

Testy proběhly na počítači s procesorem P4 (2.8GB), s 1GB paměti. Výsledky testování pro různé hodnoty paramatrů L, G a pro různá n jsou v následujících tabulkách. Přitom jsme použili tohoto označení

IPM N	—	metoda vnitřních bodů s krokem určeným pouze Newtonovou
		metodou
IPM PF	_	metoda sledování cesty s pevnou hodnotou parametrů σ_l a σ_k ,
		konkrétně $\sigma_l = 2 \cdot 10^{-2}$ a $\sigma_k = 2 \cdot 10^{-2}$
IPM MPC	_	Mehrotrova metoda typu prediktor-korektor
\mathbf{QPC}	_	je použita jako referenční metoda k porovnání

Červenou barvou jsou vyznačeny výsledky u Newtonovy metody, kdy výpočet zhavaroval, neboť tato metoda nezajistí splnění podmínky

$$(\bar{\mathbf{x}}_1, \bar{\mathbf{x}}_2, \bar{\mathbf{x}}_3, \bar{\mathbf{x}}_4, \bar{\boldsymbol{\lambda}}, \bar{\mathbf{s}}, \bar{\boldsymbol{\mu}}, \bar{\mathbf{d}}) \in \mathcal{F}_N^0.$$

4.1 Porovnání metod

V následujících tabulkách jsou pro různé hodnoty parametrů G a L uvedeny počty iterací a výpočetní časy jednotlivých metod. Volbou parametrů G a L je ovlivněn počet aktivních a neaktivních omezení v optimálním řešení dané úlohy.

n	QPC		IPM N		IPM PF		IPM MPC	
	Čas	Iter.	Čas	Iter.	Čas	Iter.	Ċas	Iter.
8	0.01	4	0.03	33	0.02	30	0.04	44
16	0.01	7	0.03	39	0.02	34	0.03	35
32	0.02	18	0.04	45	0.03	37	0.05	37
64	0.03	26	0.05	50	0.05	42	0.05	28
128	0.04	40	0.08	48	0.07	44	0.09	33
256	0.13	118	0.13	48	0.10	41	0.10	24
512	0.43	302	0.21	42	0.16	36	0.20	25
1024	1.73	775	0.49	41	0.32	30	0.42	23
2048	5.29	1315	0.93	35	0.76	28	0.78	16

Tabulka 1: G=0.001, L=0.000

n	QI	\mathbf{QPC}		IPM N		IPM PF		IPM MPC	
	Čas	Iter.	Čas	Iter.	Ċas	Iter.	Čas	Iter.	
8	0.01	8	0.03	50	0.02	34	0.02	25	
16	0.02	13	0.04	61	0.03	39	0.03	27	
32	0.03	26	0.08	86	0.04	49	0.03	21	
64	0.05	60	0.12	102	0.06	53	0.03	21	
128	0.11	123	0.56	281	0.09	52	0.05	21	
256	0.38	369	0.68	218	0.15	59	0.08	20	
512	1.31	961	0.77	148	0.21	44	0.16	19	
1024	7.30	3366	1.25	124	0.48	47	0.33	18	
2048	39.99	9986	2.86	130	1.13	43	0.96	20	

Tabulka 2: G=0.100, L=0.000

n	Q	QPC		IPM N		IPM PF		IPM MPC	
	Čas	Iter.	Čas	Iter.	Čas	Iter.	Čas	Iter.	
8	0.09	12	0.16	74	0.03	38	0.03	13	
16	0.03	31	0.02	28	0.02	28	0.01	15	
32	0.07	86	0.02	27	0.03	29	0.02	13	
64	0.15	202	0.06	56	0.04	35	0.03	18	
128	0.55	674	0.38	208	0.11	61	0.05	18	
256	1.67	1670	1.73	616	0.41	144	0.08	20	
512	5.86	4086	6.80	1275	1.32	257	0.19	24	
1024	30.01	12273	18.80	1846	4.08	408	0.55	34	
2048	85.16	20001	42.40	1919	13.48	600	2.08	64	

Tabulka 3: G=1.400, L=0.000

n	QPC		IPM N		IPM PF		IPM MPC	
	Čas	Iter.	Čas	Iter.	Čas	Iter.	Čas	Iter.
8	0.02	19	0.02	30	0.01	20	0.01	15
16	0.01	3	0.01	8	0.01	12	0.01	7
32	0.01	3	0.01	9	0.01	13	0.01	8
64	0.01	3	0.02	11	0.01	14	0.01	9
128	0.01	3	0.02	11	0.02	15	0.02	9
256	0.01	3	0.04	12	0.04	15	0.04	9
512	0.01	3	0.07	12	0.08	16	0.08	9
1024	0.01	3	0.16	11	0.22	16	0.20	9
2048	0.02	3	0.60	11	0.58	16	0.54	9

Tabulka 4: G=2.000 , L=-1.500

n	\mathbf{QPC}		IPM N		IPM PF		IPM MPC	
	Čas	Iter.	Čas	Iter.	Čas	Iter.	Čas	Iter.
8	0.02	12	0.04	57	0.02	30	0.01	13
16	0.02	14	0.02	25	0.01	20	0.01	10
32	0.02	20	0.03	30	0.02	23	0.01	11
64	0.05	50	0.08	73	0.03	29	0.02	13
128	0.11	125	0.24	144	0.06	41	0.04	16
256	0.30	290	0.68	243	0.13	53	0.08	18
512	0.70	520	1.81	372	0.30	71	0.18	24
1024	2.94	1408	5.08	474	1.05	111	0.65	30
2048	12.48	3202	18.15	582	4.17	145	2.17	38

Tabulka 5: G=2.000 , L=-0.500

n	QI	PC	IPN	4 N	IPM PF		IPM MPC	
	Čas	Iter.	Čas	Iter.	Čas	Iter.	Ċas	Iter.
8	0.02	15	0.05	80	0.02	37	0.01	12
16	0.01	9	0.02	27	0.02	28	0.02	16
32	0.03	24	0.02	27	0.03	29	0.02	19
64	0.05	62	0.10	95	0.04	40	0.03	20
128	0.10	112	0.41	233	0.10	59	0.05	19
256	0.27	268	2.13	673	0.45	154	0.09	20
512	0.92	704	7.38	1426	1.40	275	0.15	19
1024	2.86	1396	23.13	2131	4.73	448	0.54	34
2048	15.54	3264	59.91	2252	18.55	669	2.62	64

Tabulka 6: G=2.000, L=0.000

4.2 Vliv volby počátečního řešení

V následujících dvou tabulkách je ukázán vliv počátečního řešení na čas výpočtu a počet iterací jednotlivých metod při stejných hodnotách parametrů G a L. Je zde vidět, že volbou jiného počátečního řešení získáme Newtonovou metodou optimální řešení i v případech, kde pro původní počáteční řešení zhavarovala.

n	QPC		IPM N		IPM PF		IPM MPC	
	Čas	Iter.	Čas	Iter.	Čas	Iter.	Čas	Iter.
8	0.01	8	0.03	50	0.02	34	0.02	25
16	0.02	13	0.04	61	0.03	39	0.03	27
32	0.03	26	0.08	86	0.04	49	0.03	21
64	0.05	60	0.12	102	0.06	53	0.03	21
128	0.11	123	0.56	281	0.09	52	0.05	21
256	0.38	369	0.68	218	0.15	59	0.08	20
512	1.31	961	0.77	148	0.21	44	0.16	19
1024	7.30	3366	1.25	124	0.48	47	0.33	18
2048	39.99	9986	2.86	130	1.13	43	0.96	20

Tabulka 7: Původní volba počátečního řešení pro $\mathrm{G}{=}0.100$ a $\mathrm{L}{=}0.000$

n	QI	QPC		IPM N		IPM PF		IPM MPC	
	Čas	Iter.	Ċas	Iter.	Ċas	Iter.	Ċas	Iter.	
8	0.01	8	0.04	55	0.02	31	0.03	26	
16	0.02	13	0.08	100	0.02	32	0.03	22	
32	0.05	26	0.22	139	0.05	47	0.04	24	
64	0.07	60	0.20	141	0.07	49	0.05	22	
128	0.15	123	0.48	222	0.11	59	0.07	21	
256	0.46	369	0.16	51	0.14	46	0.09	17	
512	1.60	961	0.26	44	0.24	42	0.19	18	
1024	8.87	3366	0.73	61	0.47	38	0.51	23	
2048	50.39	9986	1.80	61	1.62	52	2.22	26	

Tabulka 8: Jiná volba počátečního řešení pro G=0.100 a L=0.000

5 Závěr

Z dosažených výsledků je patrné, že metody vnitřních bodů mohou úspěšně konkurovat metodám aktivních množin, a proto bychom rádi upravili náš algoritmus pro řešení duální úlohy ke kontaktní úloze lineární elasticity [3], která má formálně stejný tvar jako naše úloha (1). Zde je ovšem jistou komplikací to, že nemáme k dispozici přímo matici **A**, ale pouze vzorec pro výpočet jejího součinu s vektorem. Teprve pro tuto úlohu bude mít vzájemné porovnání s QPC metodou větší vypovídající hodnotu, neboť tato metoda je speciálně určena pro tuto úlohu.

Literatura

- [1] Nocedal J., Wright S. J.: Numerical Optimization. Springer-Verlag, New York, 1999.
- [2] Kučera R.: Convergence rate of an optimal algorithm for minimizing quadratic functions with separable convex constraints. 2007.
- [3] Haslinger J., Kučera R., Dostál Z.: An algorithm for the numerical realization of 3D contact problems with Coulomb frictions. Journal of Computational and Applied Mathematics, 164-165 (2004), 387-408.

Univ. Palacki. Olomuc., Fac. rer. nat., Dept of Math. Anal. and Appl. of Math. ODAM (2007) 18–42

> The purpose of computing is insight, not numbers Richard Wesley Hamming (1915–1998)

Soustava nosník–pružiny–podloží po dvou letech

HORYMÍR NETUKA¹, JIŘÍ V. HORÁK²

Katedra matematické analýzy a aplikací matematiky Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého třída Svobody 26, 771 46 Olomouc, Česká republika ¹e-mail: netuka@inf.upol.cz ²e-mail: horak@inf.upol.cz

Abstrakt

Příspěvek se zabývá úlohou ohybu nosníku spočívajícího na jednostranném podloží, popř. jednostranných pružinách. Matematický model nosníku je Euler–Bernoulliův, pro podloží je použit model Winklerův. Podrobně je předvedeno numerické řešení založené na použití metody konečných prvků a úlohy lineární popř. nelineární komplementarity.

1 Úvod

Počátkem roku 2006 se oba autoři začali společně zabývat řešením ohybu nosníku na jednostranném podloží. Z literatury běžně známá úloha pracuje s podložím oboustranným, tj. pevně spojeným s nosníkem. V některých případech je takovýto model zcela adekvátní a má tu nezanedbatelnou výhodu, že je *lineární*. Pokud ovšem nosník na podloží pouze spočívá, nelze už tento model použít a je třeba uvažovat podloží jednostranné. Problém se však nyní stává *nelineárním*.

Zde jsou ovšem na místě důležitá upřesnění. Podložím se v uvedených případech obvykle míní *Winklerovo podloží*, jehož model pochází od inženýra E. Winklera (viz [13]), který působil v druhé polovině 19. století na pražském Vysokém učení technickém. Tento v zásadě nejjednodušší model nemusí vždy vyhovovat danému zadání a potom je nutné poohlédnout se po sofistikovanějších modelech, jako jsou např. model Pasternakův nebo Kerrův. Zde se budeme nadále zabývat pouze Winklerovým modelem. Pokud jde o matematicko-fyzikální model nosníku, spokojíme se s relativně nejznámějším modelem Euler–Bernoulliovým. Ten za předpokladu, že nosník je tenký a že rovina příčného řezu, která je kolmá k původní ose nosníku, zůstane i po jeho ohnutí rovinou a kolmou k deformované ose, bude reprezentován obyčejnou diferenciální rovnicí 4. řádu. Půjde tedy o 1D-úlohu.

Pro numerické řešení vybereme metodu konečných prvků, neboť dává velmi dobré možnosti pro pozdější manipulace. Umožňuje také bezprostřední rozšíření s ohledem na použité modely nosníku i podloží.

Úloha s jednostranným podložím má při obvyklé aplikaci metody konečných prvků jeden vážný problém. Je nejen nelineární, jak už bylo konstatováno výše, ale i *nediferencovatelná*. Pro zvládnutí tohoto problému si autoři od počátku zvolili formulaci prostřednictvím lineární, popř. nelineární komplementarity. Tento postup byl prezentován na ODAMu 2006. Jsou možné i jiné cesty, jednu z nich zde na ODAMu představil kolega Stanislav Sysala (viz jeden z článků připravených k publikování: [11]).

Náš příspěvek se bude věnovat formulaci diskrétní úlohy a postupu jejího řešení tak, jak se to autorům během uplynulých dvou let postupně podařilo. V intencích úvodního citátu, který náleží jednomu ze zakladatelů numerické matematiky, zde bude mít důkladné objasnění celého postupu přednost před čísly. Protože důležitým metodickým východiskem pro uvažovanou problematiku představuje studium úloh s pružnými podporami, začneme řešením těchto úloh.

2 Úloha ohybu nosníku

V celém textu budeme uvažovat kvůli jednoduchosti pouze homogenní nosník s konstantním průřezem. Nejprve si připomeňme klasickou formulaci úlohy ohybu nosníku

nalézt funkci
$$u \in C^4(0, L)$$
 tak, aby
 $EI u^{IV}(x) = f(x) \quad \forall x \in (0, L)$

kde jsme použili označení

- E modul pružnosti,
- I moment setrvačnosti průřezu,
- u velikost ohybu,
- f zatížení.

Takový tvar není vhodný pro použití metody konečných prvků, takže přejdeme k variační formulaci

nalézt funkci
$$u \in V$$
 tak, aby
 $J_N(u) = \min_{v \in V} J_N(v)$

kde značíme

V – prostor kinematicky přípustných posunutí,

 J_N – funkcionál potenciální energie nosníku:

$$J_N(v) = \frac{1}{2} EI \int_0^L (v'')^2 dx - \int_0^L fv \, dx$$

Jeho minimum pak udává variační rovnice

nalézt funkci $u \in V$ tak, aby $EI \int_{0}^{L} u''(x)v''(x) dx = \int_{0}^{L} f(x)v(x) dx \quad \forall v \in V$

která představuje výchozí bod pro metodu konečných prvků.

3 Metoda konečných prvků

Diskrétní formulace pro metodu konečných prvků (zkráceně MKP) je tedy založena na variační rovnici, pracuje však s konečnědimenzionálními proměnnými:

nalézt funkci
$$u_h \in V_h$$
 tak, aby
 $EI \int_0^L u_h''(x) v_h''(x) dx = \int_0^L f(x) v_h(x) dx \quad \forall v_h \in V_h$

kde $V_h \subseteq V$ je konečnědimenzionální podprostor, tj. dim $(V_h) < +\infty$. V rámci MKP pak pro nosníkovou úlohu obvykle volíme

 $V_h = \{ v_h \in V : v_h \in C^1(0, L), v_h \mid_K \in P_3(K) \quad \forall K \in T_h \},$

 T_h – dělení intervalu (0, L) na podintervaly $K_i = [x_{i-1}, x_i]$.

Poznamenejme, že tento postup není jediný možný a že bychom mohli použít např. nekonformní prvky.

V dalším budeme předpokládat (bez újmy na obecnosti) ekvidistantní rozdělení intervalu (0, L) na intervaly téže délky h. Na této síti definujme dva systémy bázových funkcí (podrobněji viz např. [5])

$$\varphi_i^{(1)}(x) = \begin{cases} 0 & \text{pro } x < x_{i-1} \\ -\frac{2}{h^3}(x - x_{i-1})^2(x - x_i - \frac{h}{2}) & \text{pro } x \in [x_{i-1}, x_i] \\ \frac{2}{h^3}(x - x_{i+1})^2(x - x_i + \frac{h}{2}) & \text{pro } x \in [x_i, x_{i+1}] \\ 0 & \text{pro } x > x_{i+1} \end{cases}$$

$$\varphi_i^{(2)}(x) = \begin{cases} 0 & \text{pro } x < x_{i-1} \\ \frac{1}{h^2} (x - x_{i-1})^2 (x - x_i) & \text{pro } x \in [x_{i-1}, x_i] \\ \frac{1}{h^2} (x - x_{i+1})^2 (x - x_i) & \text{pro } x \in [x_i, x_{i+1}] \\ 0 & \text{pro } x > x_{i+1}. \end{cases}$$

Snadno se lze přesvědčit, že tyto funkce mají následující vlastnosti:

$$\varphi_i^{(1)}(x_j) = \delta_{ij}, \qquad (\varphi_i^{(1)})'(x_j) = 0 \varphi_i^{(2)}(x_j) = 0, \qquad (\varphi_i^{(2)})'(x_j) = \delta_{ij},$$

kde δ_{ij} je Kroneckerovo delta.

To nám umožňuje zavést na V_h Hermiteovu interpolaci splňující podmínky stanovené v zadání prostoru V_h . Přibližné řešení výše uvedené diskrétní úlohy můžeme pak psát ve tvaru

$$u_h(x) = \sum_{i=1}^N (c_{2i-1}\varphi_i^{(1)}(x) + c_{2i}\varphi_i^{(2)}(x)).$$

Po dosazení do diskrétní formulace, kde za testovací funkce v_h vezmeme uvedené bázové funkce, a potřebných výpočtech obdržíme soustavu lineárních algebraických rovnic. Její *i*-tý a (i + 1)-ní řádek vypadají takto

$$\frac{EI}{h^3} \begin{pmatrix} -12 & -6h & 24 & 0 & -12 & 6h \\ 6h & 2h^2 & 0 & 8h^2 & -6h & 2h^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{i-1} \\ u_{i-1} \\ u_i \\ u_i \\ u_i \\ u_{i+1} \\ u_{i+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_i \\ m_i \end{pmatrix}$$

kde

$$f_i = \int_0^L f(x)\varphi_i^{(1)}(x) \, dx \qquad m_i = \int_0^L f(x)\varphi_i^{(2)}(x) \, dx.$$

Při praktickém použití MKP (viz např. [4]) se však zpravidla místo uvedených bázových funkcí používají *tvarové funkce*, které představují restrikce bázových funkcí na jednotlivé intervaly. Jednotný tvar těchto funkcí obdržíme po transformaci na referenční interval [-1, 1]:

$$x = \frac{h}{2}(\xi + 1)$$
 $x \in K_i, \ \xi \in [-1, 1].$

Tím získáme čtyři tvarové funkce

$$N_1^{(e)}(\xi) = \frac{1}{4}(1-\xi)^2(2+\xi)$$
$$N_2^{(e)}(\xi) = \frac{1}{8}h(1-\xi)^2(1+\xi)$$
$$N_3^{(e)}(\xi) = \frac{1}{4}(1+\xi)^2(2-\xi)$$
$$N_4^{(e)}(\xi) = -\frac{1}{8}h(1+\xi)^2(1-\xi).$$

Nyní nebudeme počítat koeficienty v jednom celém řádku výsledné soustavy, ale provedeme výpočet prvků konečně-prvkové matice podle vztahů

$$(K_N^{(e)})_{ij} = EI \int_0^h \frac{d^2 N_i^{(e)}}{dx^2} \frac{d^2 N_j^{(e)}}{dx^2} dx = \frac{8EI}{h^3} \int_{-1}^{+1} \frac{d^2 N_i^{(e)}}{d\xi^2} \frac{d^2 N_j^{(e)}}{d\xi^2} d\xi,$$

což nakonec dá matici nosníkového prvku ve tvaru

$$\mathbf{K}_{N}^{(e)} = \frac{EI}{h^{3}} \begin{pmatrix} 12 & 6h & -12 & 6h \\ 6h & 4h^{2} & -6h & 2h^{2} \\ -12 & -6h & 12 & -6h \\ 6h & 2h^{2} & -6h & 4h^{2} \end{pmatrix}$$

Následně provedeme "poskládání" těchto matic do výsledné matice \mathbf{K}_N , která reprezentuje tuhost daného nosníku. Matice dvou sousedních prvků $\mathbf{K}_N^{(i)}$ a $\mathbf{K}_N^{(i+1)}$ vytvoří kompletní řádky 2i + 1 a 2i + 2 matice \mathbf{K}_N takto (index N vynecháváme)

Podobně si počínáme při vytváření pravé strany soustavy rovnic. Nejprve určíme vektor zatížení prvku. Např. pro rovnoměrné zatížení o velikosti p použijeme vztahy

$$f_i^{(e)} = \frac{1}{2} ph \int_{-1}^{+1} N_i^{(e)}(\xi) \, d\xi \quad i = 1, 2, 3, 4,$$

které po vyčíslení dávají vektor

$$\mathbf{f}^{(e)} = ph \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{12}h \\ \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{12}h. \end{pmatrix}$$

Z takových
to příspěvků pak sestavíme výsledný vektor ${\bf f}$ pravé strany, který reprezentuje zatížení celého no
sníku.

Výsledná soustava bude mít tvar

 $\mathbf{K}_N \, \mathbf{u} = \mathbf{f}$

kde \mathbf{K}_N – matice tuhosti nosníku,

- \mathbf{u} vektor neznámých (zobecněných) posunutí,
- \mathbf{f} vektor (zobecněných) zatížení.

Je to soustava lineárních algebraických rovnic, která je, jak plyne z předchozích rozborů, sedmidiagonální. Matice soustavy je symetrická a pozitivně semidefinitní. Poznamenejme, že taková matice není regulární. Jednoznačnost řešení dané úlohy lze zajistit až zadáním vhodných okrajových podmínek (podrobnosti viz např. [10]). Lze ukázat, že řešení homogenního nosníku pomocí MKP splňuje vlastnost tzv. *superkonvergence*, tj. dává přesné uzlové hodnoty (viz např. [5]).

4 Úlohy s pružnými podporami



Obrázek 1: Pružně podepřený nosník

Uvažujme modelový případ nosníku vetknutého na jednom konci a podepřeného pružinou na konci druhém (viz obr. 1, přičemž upozorňujeme na orientaci os, jež bývá často používána v technické literatuře). V takovém zadání můžeme rozlišit dva případy

- pružina je s nosníkem pevně spojená hovoříme o *oboustranné* pružině,
- pružina nosník pouze podpírá hovoříme o *jednostranné* pružině.

Zatímco v klasické formulaci zadáváme tuto úlohu pomocí okrajových podmínek, v případě variační formulace to provádíme pomocí funkcionálu potenciální energie pružiny. Označme q tuhost dané pružiny. Rozdíly v obou úlohách ukazuje následující přehled:

klasická oboustranná pružina

jednostranná pružina

okrajová podmínka	$u^{\prime\prime\prime}(L) = qu(L)$	$u^{\prime\prime\prime}(L) = qu^+(L)$
potenciální energie	$J_P(v) = \frac{1}{2} q(v(L))^2$	$\tilde{J}_P(v) = \frac{1}{2} q(v^+(L))^2$

 $u^+(L)$ tady značí hodnotu kladné části funkce u, tj.

$$u^{+}(x) = \frac{u(x) + |u(x)|}{2}$$

v bodě x = L.

Funkcionál potenciální energie soustavy nosník+ pružina je pak dán součtem energií obou komponent, takže pro jednostrannou pružinu máme

$$\tilde{J}_{N+P}(v) = \frac{1}{2} EI \int_{0}^{L} (v'')^2 dx + \frac{1}{2} q(v^+(L))^2 - \int_{0}^{L} fv \, dx$$

Snadno odvodíme, že variační rovnice pro tento problém bude vyhlížet takto

$$EI\int_{0}^{L} u''(x)v''(x) \, dx + qu^{+}(L)v(L) = \int_{0}^{L} f(x)v(x) \, dx \quad \forall v \in V$$

a její diskrétní podoba bude mít proto tvar

$$EI\int_{0}^{L} u_{h}''(x)v_{h}''(x) \, dx + qu_{h}^{+}(L)v_{h}(L) = \int_{0}^{L} f(x)v_{h}(x) \, dx \quad \forall v_{h} \in V_{h}$$

Prostory V a V_h mají tentýž význam jako výše.

Takto zformulovaná úloha však není pro další algoritmické zpracování vhodná. K jejímu upravení využijeme jednoduchou rovnost (pro x = L)

$$q(x) u_h^+(x) = \tilde{q}(x) u_h(x),$$

kde definujeme

$$\tilde{q}(x) = \begin{cases} q(x) \text{ pro } u_h(x) > 0\\ 0 \text{ pro } u_h(x) \le 0 \end{cases}$$

Diskrétní úloha pro MKP pak po úpravě bude

nalézt funkci
$$u_h \in V_h$$
 tak, aby

$$EI \int_{0}^{L} u_h''(x) v_h''(x) \, dx + \tilde{q} u_h(L) v_h(L) = \int_{0}^{L} f(x) v_h(x) \, dx \quad \forall v_h \in V_h$$

Nyní můžeme postupovat stejně jako v předcházející kapitole a na závěr obdržíme výslednou soustavu tvaru

$$\mathbf{K}(\mathbf{u})\,\mathbf{u}=\mathbf{f}$$

Ta je však, narozdíl od předchozího, *nelineární*, neboť hodnoty některých prvků matice soustavy již nejsou konstantní, ale závisí na hodnotách **u**. Navíc není obtížné nahlédnout, že závislost **K** na **u** je *nediferencovatelná*. Z toho důvodu k jejímu řešení nelze použít Newtonovu metodu nebo kvazinewtonovské metody. Lze však použít metody *úloh lineární komplementarity*, jak uvidíme v další kapitole.

Dříve než tak učiníme, objasníme si důkladně podstatu problému, a to na jednoduchém příkladu s 2 ekvidistantními nosníkovými prvky a 2 pružinami tuhosti q_1 a q_2 podle následujícího schématu:



Na základě výkladu z předcházející kapitoly má matice soustavy, která byla vytvořena ze dvou stejně velkých prvků, tvar

$$\underbrace{EI}_{h^3} \begin{pmatrix} 12 & 6h & -12 & 6h & 0 & 0\\ 6h & 4h^2 & -6h & 2h^2 & 0 & 0\\ -12 & -6h & \boxed{24} & 0 & -12 & 6h\\ 6h & 2h^2 & 0 & 8h^2 & -6h & 2h^2\\ 0 & 0 & -12 & -6h & \boxed{12} & -6h\\ 0 & 0 & 6h & 2h^2 & -6h & 4h^2 \end{pmatrix} \\
 \uparrow +q_1 \qquad \uparrow +q_2$$

V označených místech ještě neznáme správné hodnoty prvků matice tuhosti, neboť ty závisí na tom, jaký bude výsledný ohyb nosníku. V případě, že neznámá u_2 bude kladná, musíme k stávající hodnotě $24EI/h^3$ připočítat ještě hodnotu tuhosti pružiny q_1 . Analogicky tomu bude u hodnoty $12EI/h^3$, kdy v případě, že neznámá u_3 bude kladná, musíme připočítat ještě hodnotu tuhosti pružiny q_2 .

5 Úloha lineární komplementarity

Nejprve se seznámíme definicí úlohy lineární komplementarity

nalézt vektory \mathbf{w} a \mathbf{z} tak, aby $\mathbf{w} = \mathbf{M}\mathbf{z} + \mathbf{q}$ $\mathbf{w}^T \mathbf{z} = 0$ $\mathbf{w}, \mathbf{z} \ge 0$

kde \mathbf{M} – daná čtvercová matice,

q – daný vektor.

Nebudeme zde tuto úlohu rozebírat. Podrobné analýzy lze nalézt např. v [7].

Nyní ukážeme, jak se dá úloha s jednostrannými pružinami interpretovat pomocí lineární komplementarity. Nejprve položíme v diskrétní formulaci

$$u_h = u_h^+ - u_h^-$$
: $u_h^+ = \frac{1}{2} (u_h + |u_h|), \ u_h^- = \frac{1}{2} (-u_h + |u_h|).$

Veličinám u_h^+, u_h^- přiřadíme v algebraickém zápise nezáporné vektory ${\bf v}, {\bf w},$ takže platí

$$\mathbf{u} = \mathbf{v} - \mathbf{w}.$$

Po dosazení obdržíme

$$\mathbf{K}(\mathbf{u})\,\mathbf{u} = \mathbf{K}_{N+P}\,\mathbf{v} - \mathbf{K}_N\,\mathbf{w},$$

kde \mathbf{K}_{N+P} – matice tuhosti soustavy nosník + pružiny.

Úloha, kterou jsme nyní obdrželi, představuje speciální variantu úlohy LCP, a to tzv. *úlohu horizontální komplementarity*

$$\begin{array}{l} \mathbf{K}_{N+P} \, \mathbf{v} = \mathbf{K}_N \, \mathbf{w} + \mathbf{f} \\ \mathbf{v}^T \mathbf{w} = 0 \\ \mathbf{v}, \, \mathbf{w} \geq 0 \end{array} \qquad \qquad \mathbf{hLCP} \end{array}$$

Pro její řešení lze použít Lemkeho metodu, která pracuje na principu podobném simplexové metodě a jejíž popis je např. v [7]. Příklady takto vypočítané byly autory publikovány např. v [3], [8].

Uvedený postup byl v uplynulých dvou letech vylepšen tak, aby byl více efektivní. Pod pojmem "efektivní způsob řešení" rozumíme postup, který je založen na následujících bodech

- rozložení na kladné a záporné části provést jen tam, kde je to z hlediska řešení nutné
- zachovat pásovou strukturu matice \mathbf{K}_N
- Lemkeho metodu nahradit robustnější metodou, která nebude mít problémy např. se semidefinitními úlohami

Nový postup řešení si budeme demonstrovat na témže příkladu, jako výše, tj.

takže již víme, že příslušná soustava vyhlíží následovně

$$\underbrace{EI}_{h^3} \begin{pmatrix} 12 & 6h & -12 & 6h & 0 & 0 \\ 6h & 4h^2 & -6h & 2h^2 & 0 & 0 \\ -12 & -6h & \boxed{24} & 0 & -12 & 6h \\ 6h & 2h^2 & 0 & 8h^2 & -6h & 2h^2 \\ 0 & 0 & -12 & -6h & \boxed{12} & -6h \\ 0 & 0 & 6h & 2h^2 & -6h & 4h^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_1' \\ u_2 \\ u_2' \\ u_3 \\ u_3' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ m_1 \\ f_2 \\ m_2 \\ f_3 \\ m_3 \end{pmatrix}.$$

Označené prvky matice tuhosti K_{33} a K_{55} se ještě mohou (v závislosti na výsledku) změnit.

Nejprve definujme nové neznámé

$$v_1 = u_2^+, \qquad w_1 = u_2^-, v_2 = u_3^+, \qquad w_2 = u_3^-,$$

a dosadíme vztahy

$$u_2 = v_1 - w_1,$$

 $u_3 = v_2 - w_2,$

do výše uvedené soustavy. Obdržíme (z úsporných důvodů budeme nadále používat označení $c=EI/h^3)$

$$K_{33}u_2 = (24c + q_1)v_1 - (24c)w_1 = (24c)u_2 + q_1v_1,$$

$$K_{55}u_3 = (12c + q_2)v_2 - (12c)w_2 = (12c)u_3 + q_2v_2,$$

což znamená změnu levé strany dané soustavy do následující podoby

$$\begin{pmatrix} 12c & 6ch & -12c & 6ch & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 6ch & 4ch^2 & -6ch & 2ch^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -12c & -6ch & 24c & 0 & -12c & 6ch & q_1 & 0 & 0 & 0 \\ 6ch & 2ch^2 & 0 & 8ch^2 & -6ch & 2ch^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -12c & -6ch & 12c & -6ch & 0 & q_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 6ch & 2ch^2 & -6ch & 4ch^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_1 \\ u_2 \\ u_2 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_3 \\ u_3 \\ v_1 \\ v_2 \\ w_1 \\ w_2 \end{pmatrix}$$

Mechanicky to lze interpretovat jako rozložení dané soustavy na dvě části – nosník a pružiny. Následně provedeme spojení obou částí pomocí přidání vztahů

$$u_2 - v_1 + w_1 = 0$$

$$u_3 - v_2 + w_2 = 0$$

do předchozí soustavy, čímž získáme

$$\begin{pmatrix} 12c & 6ch & -12c & 6ch & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 6ch & 4ch^2 & -6ch & 2ch^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -12c & -6ch & 24c & 0 & -12c & 6ch & q_1 & 0 & 0 & 0 \\ 6ch & 2ch^2 & 0 & 8ch^2 & -6ch & 2ch^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -12c & -6ch & 12c & -6ch & 0 & q_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 6ch & 2ch^2 & -6ch & 4ch^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_3 \\ v_1 \\ v_2 \\ w_1 \\ w_2 \end{pmatrix}$$

Tím bychom mohli skončit, je však ještě možné (a pro další účely výhodné) provést symetrizaci dané soustavy takto

											$\langle u_1 \rangle$	
/	' 12c	6ch	-12c	6ch	0	0	0	0	0	0 \	u_{1}^{\prime}	
	6ch	$4ch^2$	-6ch	$2ch^2$	0	0	0	0	0	0	u_2	
	-12c	-6ch	24c	0	-12c	6ch	q_1	0	0	0	u_2^{\prime}	
	6ch	$2ch^2$	0	$8ch^2$	-6ch	$2ch^2$	0	0	0	0	u_3	
	0	0	-12c	-6ch	12c	-6ch	0	q_2	0	0	u'_3	
	0	0	6ch	$2ch^2$	-6ch	$4ch^2$	0	0	0	0	v_1	
	0	0	q_1	0	0	0	$-q_1$	0	q_1	0	v_2	
ľ	0	0	0	0	q_2	0	0	$-q_{2}$	0	q_2	w_1	
											$\langle w_2 \rangle$	

Naznačené rozdělení na jednotlivé bloky využijeme pro nové zformulování uvažovaného problému (přičemž z "estetických" důvodů použijeme označení $\mathbf{R} = \mathbf{K}_N$)

nalézt vektory **u**, **v** a **w** tak, aby

$$\begin{pmatrix} \mathbf{R} & \mathbf{S}^T & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{S} & -\mathbf{D} & \mathbf{D} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{v} \\ \mathbf{w} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{o} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{w}^T \mathbf{w} = 0$$

$$\mathbf{v}, \mathbf{w} \ge 0$$

$$\mathbf{w} = \mathbf{0}$$

Tato úloha je opět speciální variantou úlohy LCP, která se nazývá *úloha smíšené lineární komplementarity*. Její specifikum spočívá v tom, že obsahuje proměnné, které jsou (z hlediska komplementarity) volné. Zajímavost zde představuje, že

$$\begin{pmatrix} \mathbf{R} & \mathbf{S}^T \\ \mathbf{S} & -\mathbf{D} \end{pmatrix}$$

je tzv. kvazidefinitní matice, tj. matice, pro niž existuje stabilní faktorizace tvaru $\widetilde{\mathbf{LDL}}^T$ (blíže viz [12]).

Metody řešení, které pro tuto úlohu přicházejí do úvahy, představují zejména

- Lemkeho metoda,
- metody vnitřních bodů,
- Gauss–Seidelova metoda s projekcí.

Druhou a třetí možnost vyložíme v dalším podrobněji.

6 Primárně-duální metoda vnitřních bodů

Metody vnitřních bodů (IPM) jsou již nějakou dobu v centru zájmu specialistů z oblasti numerické optimalizace. Přestože úlohy LCP nepatří striktně vzato mezi optimalizační úlohy, existuje zde velmi silná vzájemná vazba (bude o ní ještě řeč později). To zakládá možnosti využití některých principů IPM pro řešení problémů komplementarity. Z pochopitelných důvodů se zde nebudeme problematikou IPM zabývat a pro důkladnější seznámení odkazujeme např. na knihu [1] nebo obsáhlý článek [2].

Pro účely řešení úlohy mLCP je vhodná tzv. primárně-duální metoda vnitřních bodů (viz např. [9]), která pracuje s linearizovanou soustavou podobně jako Newtonova metoda. V našem případě je zásadním krokem k jejímu použití linearizace skalárního součinu $\mathbf{v}^T \mathbf{w} = 0$. Vzhledem k tomu, že máme zadanou i podmínku $\mathbf{v}, \mathbf{w} \ge 0$, platí ve skutečnosti

$$v_i w_i = 0 \quad \forall i = 1, \dots, m.$$

To lze zřejmě přepsat takto

$$\mathbf{V}\mathbf{W}\mathbf{e}=\mathbf{o},$$

kde $\mathbf{V} = \text{diag}(v_1, v_2, \dots, v_m), \mathbf{W} = \text{diag}(w_1, w_2, \dots, w_m), \mathbf{e} = (1, 1, \dots, 1)^T$. Linearizaci pak provedeme na základě vztahu

$$(\mathbf{V} + \Delta \mathbf{V}) (\mathbf{W} + \Delta \mathbf{W}) \mathbf{e} = \mathbf{V} \mathbf{W} \mathbf{e} + \mathbf{W} \Delta \mathbf{v} + \mathbf{V} \Delta \mathbf{w},$$

takže linearizovaná soustava má pro daný přípustný bod tvar

$$\begin{pmatrix} \mathbf{R} & \mathbf{S}^T & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{S} & -\mathbf{D} & \mathbf{D} \\ \mathbf{0} & \mathbf{W} & \mathbf{V} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{u} \\ \Delta \mathbf{v} \\ \Delta \mathbf{w} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{o} \\ \mathbf{o} \\ -\mathbf{VWe} \end{pmatrix}.$$

Použití této soustavy v intencích metody vnitřních bodů značí, že přípustný bod $(\mathbf{u}^k, \mathbf{v}^k, \mathbf{w}^k)$ bude navíc splňovat podmínku pro vnitřní body

$$v_i^k, w_i^k > 0 \quad \forall i = 1, \dots, m$$

a že i následující iterace, kterou dostaneme pomocí vztahu

$$(\mathbf{u}^{k+1}, \mathbf{v}^{k+1}, \mathbf{w}^{k+1}) = (\mathbf{u}^k, \mathbf{v}^k, \mathbf{w}^k) + \alpha_k(\Delta \mathbf{u}^k, \Delta \mathbf{v}^k, \Delta \mathbf{w}^k),$$

to volbou vhodného kroku $\alpha_k > 0$ zachová.

Nyní již můžeme uvést algoritmus řešení úlohy mLCP, když ještě před tím do soustavy zavedeme parametry σ_k a r_k známé z praxe IPM (oba lze ve výpočetně příznivých případech volit nulové).

Algoritmus primárně-duální metody

Zadáme ($\mathbf{u}^0, \mathbf{v}^0, \mathbf{w}^0$) tak, že ($\mathbf{v}^0, \mathbf{w}^0$) > 0. Položíme k = 0 a $\mu = \mathbf{v}^{0^T} \mathbf{w}^0 / m$. repeat

> Zvolíme $\sigma_k \in [0, 1]$ a perturbační člen r_k . Pro hodnoty $(\mathbf{u}^k, \mathbf{v}^k, \mathbf{w}^k)$ vyřešíme soustavu

$$\begin{pmatrix} \mathbf{R} & \mathbf{S}^T & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{S} & -\mathbf{D} & \mathbf{D} \\ \mathbf{0} & \mathbf{W} & \mathbf{V} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{u}^k \\ \Delta \mathbf{v}^k \\ \Delta \mathbf{w}^k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{o} \\ \mathbf{o} \\ -\mathbf{V}\mathbf{W}\mathbf{e} + \sigma_k\mu_k\mathbf{e} + r_k \end{pmatrix}$$

Zvolíme přípustný krok délky $\alpha_k \in (0, 1]$ a položíme

$$(\mathbf{u}^{k+1}, \mathbf{v}^{k+1}, \mathbf{w}^{k+1}) = (\mathbf{u}^k, \mathbf{v}^k, \mathbf{w}^k) + \alpha_k (\Delta \mathbf{u}^k, \Delta \mathbf{v}^k, \Delta \mathbf{w}^k),$$
$$\mu_{k+1} = \mathbf{v}^{k+1^T} \mathbf{w}^{k+1} / m,$$
$$k = k + 1.$$

<u>until</u> splnění ukončovacího kritéria

7 Gauss–Seidelova metoda s projekcí

Další zajímavou možností, jak vyřešit úlohu mLCP, je využití podmínek $\mathbf{v}, \mathbf{w} \geq 0$ prostřednictvím metod s projekcemi. Zde stojí za úvahu především Gauss–Seidelova metoda s projekcí, která byla předložena v [6]. K její realizaci stačí provést známý rozklad

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}_L + \mathbf{R}_D + \mathbf{R}_U$$

matice ${\bf R}$ na levou dolní, diagonální a pravou horní část. Algoritmus metody pak vyhlíží následovně

Algoritmus Gauss-Seidelovy metody s projekcí

Zvolíme $\mathbf{u}^0, \mathbf{v}^0$ tak, že $\mathbf{v}^0 > 0$. Položíme k = 0. repeat

Určíme hodnoty \mathbf{u}^{k+1} řešením soustavy

$$\mathbf{R}_D \, \mathbf{u}^{k+1} = \mathbf{f} - \mathbf{R}_L \, \mathbf{u}^{k+1} - \mathbf{R}_U \, \mathbf{u}^k - \mathbf{S}^T \, \mathbf{v}^k$$

Gauss–Seidelovou metodou. Určíme hodnoty \mathbf{v}^{k+1} řešením soustavy

$$\mathbf{D}\,\mathbf{v}^{k+1} = \mathbf{S}\,\mathbf{u}^{k+1}$$

 $\underline{\text{If}} (\mathbf{v}^{k+1})_i < 0 \underline{\text{then}} (\mathbf{v}^{k+1})_i = 0.$ Určíme hodnoty \mathbf{w}^{k+1} řešením soustavy

$$\mathbf{D} \mathbf{w}^{k+1} = \mathbf{D} \mathbf{v}^{k+1} - \mathbf{S} \mathbf{u}^{k+1}$$

Položíme k = k + 1. <u>until</u> splnění ukončovacího kritéria

8 Úlohy s Winklerovým podložím



Obrázek 2: "Bed of springs"

Úlohy s pružinami představovaly jistou průpravu k náročnější problematice, jíž je úloha s podložím. V dalším budeme uvažovat Winklerův model homogenního podloží (viz obr. 2), který fyzikálně funguje tak trochu podobně jako postel s péry. Rovnice nosníku s klasickým oboustranným podložím má tvar

nalézt funkci $u \in C^4(0, L)$ tak, aby $EI u^{IV}(x) + q u(x) = f(x) \quad \forall x \in (0, L)$

kdeq– koeficient poddajnosti (tuhosti) podloží. Analogicky jako v první kapitole můžeme napsat funkcionál potenciální energie podloží

$$J_P(v) = \frac{1}{2} q \int_{0}^{L} (v)^2 dx,$$

funkcionál potenciální energie soustavy nosník + podloží

$$J_{N+P}(v) = \frac{1}{2} EI \int_{0}^{L} (v'')^2 dx + \frac{1}{2} q \int_{0}^{L} (v)^2 dx - \int_{0}^{L} f v \, dx,$$

příslušnou variační rovnici

$$EI\int_{0}^{L} u''(x)v''(x) \, dx + q \int_{0}^{L} u(x)v(x) \, dx = \int_{0}^{L} f(x)v(x) \, dx \quad \forall v \in V$$

a odtud diskrétní formulaci, z níž bude vycházet MKP

nalézt funkci
$$u_h \in V_h$$
 tak, aby

$$EI\int_{0}^{L} u_h''(x)v_h''(x) dx + q\int_{0}^{L} u_h(x)v_h(x) dx = \int_{0}^{L} f(x)v_h(x) dx \quad \forall v_h \in V_h$$

Prostory V a V_h mají tentýž význam jako výše.

Jelikož jsme sestavení konečně-prvkové matice nosníku již probrali v kapitole druhé, stačí nám doplnit výpočet o matici podloží. Její prvky určíme ze vztahů

$$(K_P^{(e)})_{ij} = q \int_0^h N_i^{(e)}(x) N_j^{(e)}(x) \, dx = \frac{qh}{2} \int_{-1}^{+1} N_i^{(e)}(\xi) N_j^{(e)}(\xi) \, d\xi$$

takže matice Winklerova podloží bude vyhlížet takto

$$\mathbf{K}_{P}^{(e)} = \frac{qh}{420} \begin{pmatrix} 156 & 22h & 54 & -13h \\ 22h & 4h^{2} & 13h & -3h^{2} \\ 54 & 13h & 156 & -22h \\ -13h & -3h^{2} & -22h & 4h^{2}. \end{pmatrix}$$

Výsledná soustava pak bude mít matici sestavenou z jednotlivých konečně-prvkových matic nosníku i podloží, tedy

 $\mathbf{K}_{N+P}\,\mathbf{u}=\mathbf{f}$

kde \mathbf{K}_{N+P} - matice tuhosti soustavy nosník + podloží. Poznamenejme, že v úlohách s podložím již k superkonvergenci, zmíněné v třetí kapitole, nedochází.

9 Jednostranné Winklerovo podloží

Jelikož klasické oboustranné podloží, tj. podloží pevně spojené s nosníkem, je z literatury dobře známé, zaměříme v dalším pozornost již jen na podloží jednostranné, které s nosníkem spojené není. Postupovat budeme analogicky, jako tomu bylo u úloh s pružnými podporami.

Nejprve stanovíme funkcionál potenciální energie podloží. Jeho tvar bude zřejmě

$$\tilde{J}_P(v) = \frac{1}{2} q \int_0^L (v^+)^2 dx.$$

Odtud dostaneme funkcionál potenciální energie soustavy nosník $+ \, ({\rm jednostranné})$ podloží

$$\tilde{J}_{N+P}(v) = \frac{1}{2} EI \int_{0}^{L} (v'')^2 dx + \frac{1}{2} q \int_{0}^{L} (v^+)^2 dx - \int_{0}^{L} fv \, dx$$

a jeho derivováním variační rovnici

$$EI\int_{0}^{L} u''(x)v''(x) \, dx + q \int_{0}^{L} u^{+}(x)v(x) \, dx = \int_{0}^{L} f(x)v(x) \, dx \quad \forall v \in V$$

jejíž diskrétní podoba bude tato

$$EI\int_{0}^{L} u_{h}''(x)v_{h}''(x)\,dx + q\int_{0}^{L} u_{h}^{+}(x)v_{h}(x)\,dx = \int_{0}^{L} f(x)v_{h}(x)\,dx \quad \forall v_{h} \in V_{h}$$

Prostory V a V_h mají tentýž význam jako výše.

Standardní MKP nedokáže pracovat s funkcem
i $u_h^+.$ Abychom se jejich použití vyhnuli, použi
jeme identitu

$$q(x) u_h^+(x) = \tilde{q}(x) u_h(x) \quad \forall x \in (0, L),$$

v níž definujeme

$$\tilde{q}(x) = \begin{cases} q(x) \text{ když } u_h(x) > 0\\ 0 \text{ když } u_h(x) \le 0 \end{cases}$$

Potom můžeme napsat upravenou diskrétní formulaci pro MKP

nalézt funkci
$$u_h \in V_h$$
 tak, aby

$$EI\int_{0}^{L} u_h''(x)v_h''(x) dx + \int_{0}^{L} \tilde{q}(x)u_h(x)v_h(x) dx = \int_{0}^{L} f(x)v_h(x) dx \quad \forall v_h \in V_h$$

Všimněme si, že v ní vystupuje neznámá funkce $\tilde{q}(x)$, která nahradila známou konstantní hodnotu q.

Tím se ovšem situace oproti úloze s pružinami zásadně změnila. Výsledná soustava teď bude mít tvar

$$\mathbf{K}(\mathbf{u}) \, \mathbf{u} = \mathbf{f}$$

a je tedy *nelineární*. Navíc závislost **K** na **u** je s ohledem na průběh funkce $\tilde{q}(x)$ *nediferencovatelná*. V důsledku toho nelze použít k jejímu řešení obvyklé metody jako např. Newtonovu metodu nebo kvazinewtonovské metody. Podobně nelze použít metody pro řešení úloh LCP, neboť toto je *nelineární komplementarita*.

Abychom pochopili lépe podstatu problému, analyzujme podrobně příklad s 2 prvky a podložím, jak ukazuje následující schema



Dále budeme postupovat jako v kapitole 4. Nejprve sestavíme z matic nosníkových prvků K_1 a K_2 celkovou matici soustavy

$$\underbrace{EI}_{h^3} \begin{pmatrix} 12 & 6h & -12 & 6h & 0 & 0 \\ 6h & 4h^2 & -6h & 2h^2 & 0 & 0 \\ \hline -12 & -6h & 24 & 0 & -12 & 6h \\ 6h & 2h^2 & 0 & 8h^2 & -6h & 2h^2 \\ 0 & 0 & -12 & -6h & 12 & -6h \\ 0 & 0 & 6h & 2h^2 & -6h & 4h^2 \end{pmatrix}$$

Dále máme ještě připravenu matici podloží, kterou jsme odvodili v předcházející kapitole

$$\frac{qh}{420} \begin{pmatrix} 156 & 22h & 54 & -13h \\ 22h & 4h^2 & 13h & -3h^2 \\ 54 & 13h & 156 & -22h \\ -13h & -3h^2 & -22h & 4h^2. \end{pmatrix}$$

Analogicky s postupem uvedeným v kapitole 4 lze očekávat, že tutu matici připočítáme k vyznačené pravé dolní části matice soustavy v případě, že dojde ke stlačení podloží, a v případě, že se tak nestane, ponecháme matici soustavy beze změny. Tak tomu bude ale jen tehdy, když bude stlačeno *celé* podloží, resp. když ke kontaktu nikde nedojde. Důvodem jsou vztahy, které slouží k výpočtu jednotlivých prvků matice podloží. Následující tabulka ukazuje vzniklou situaci. Na levé straně stojí standardní vztahy pro výpočet $(K_P^{(e)})_{ij}$ (viz kapitola 8), kdežto na pravé straně jsou ty, které je nutné použít u jednostranného podloží:

nelze počítat podle	je nutné použít
$q \int_{a}^{h} N_{i}^{(e)}(x) N_{i}^{(e)}(x) dx$	$\int_{a}^{h} \tilde{q}(x) N_{i}^{(e)}(x) N_{i}^{(e)}(x) dx$
$\begin{array}{c} 1 j i () j () \\ 0 \\ +1 \end{array}$	$ \begin{array}{c} $
$\frac{qh}{2} \int N_i^{(e)}(\xi) N_j^{(e)}(\xi) d\xi$	$\frac{h}{2} \int \tilde{q}(x) N_i^{(e)}(\xi) N_j^{(e)}(\xi) d\xi$
-1	-1

Hodnoty funkce $\tilde{q}(x)$ ale pochopitelně předem neznáme.

10 Úloha nelineární komplementarity

V porovnání s úlohou LCP má úloha nelineární komplementarity tvar

nalézt vektory \mathbf{w} a \mathbf{z} tak, aby $\mathbf{w} = \mathbf{M}(\mathbf{z}) \mathbf{z} + \mathbf{q}$ $\mathbf{w}^T \mathbf{z} = 0$ $\mathbf{w}, \mathbf{z} \ge 0$

kde $\mathbf{M}(\mathbf{z})$ – čtvercová matice (pro dané $\mathbf{z}),$
 \mathbf{q} – daný vektor. Obecná formulace předpokládá zadanou nelineární vektorovou funkci
 $\mathbf{F}(\mathbf{z})$

nalézt vektor
$$\mathbf{z}$$
 tak, aby
 $\mathbf{z}^T \mathbf{F}(\mathbf{z}) = 0$
 $\mathbf{z} \ge 0, \ \mathbf{F}(\mathbf{z}) \ge 0$

V dalším ukážeme, jak se dá úloha s jednostranným podložím interpretovat pomocí nelineární komplementarity. Nejprve položíme (stejně jako v kapitole 5) v diskrétní formulaci

$$u_h = u_h^+ - u_h^-$$
: $u_h^+ = \frac{1}{2} (u_h + |u_h|), \ u_h^- = \frac{1}{2} (-u_h + |u_h|).$

Veličinám u_h^+, u_h^- přiřadíme v algebraickém zápise nezáporné vektory ${\bf v}, {\bf w},$ takže platí

$$\mathbf{u} = \mathbf{v} - \mathbf{w}$$

Po dosazení obdržíme

$$\mathbf{K}(\mathbf{u})\,\mathbf{u} = \mathbf{K}_{N+P}(\mathbf{u})\,\mathbf{v} - \mathbf{K}_N\,\mathbf{w}$$

a takto vzniklá úloha představuje analogicky s kapitolou 5 úlohu horizontální komplementarity

Úlohy NCP nejsou obecně snadno řešitelné (viz např. [7]). Jako metoda řešení úlohy hNCP byla vyzkoušena *metoda sekvenciálních úloh LCP* ve spojení s Lemkeho metodou. S ohledem na stručnost a přehlednost ji popíšeme pro úlohu NCP: v k-tém kroku, kdy máme k dispozici \mathbf{z}^k , iteraci \mathbf{z}^{k+1} vypočítáme řešením linearizované úlohy

$$\begin{array}{c|c} \mathbf{z}^{T} \left(\mathbf{F}(\mathbf{z}^{k}) + \mathbf{F}'(\mathbf{z}^{k})(\mathbf{z} - \mathbf{z}^{k}) \right) = 0 \\ \mathbf{z} \geq 0, \ \mathbf{F}(\mathbf{z}^{k}) + \mathbf{F}'(\mathbf{z}^{k})(\mathbf{z} - \mathbf{z}^{k}) \geq 0 \end{array} \right| \quad \mathbf{LCP}$$

Příklady vypočítané uvedeným postupem byly autory publikovány např. v [3], [8].

Po dvou letech lze však předložit "efektivní způsob řešení" v tom smyslu, jak byl tento pojem vymezen v kapitole 5. Pro jeho lepší pochopení se vrátíme k příkladu z předchozí kapitoly:

$$\overbrace{\begin{array}{ccc} K_1 & K_2 \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & & \\ & & & & \\$$

Soustava rovnic, kde ještě není zahrnuto podloží, bude vyhlížet následovně

$$\frac{EI}{h^3} \begin{pmatrix} 12 & 6h & -12 & 6h & 0 & 0 \\ 6h & 4h^2 & -6h & 2h^2 & 0 & 0 \\ \hline -12c & -6h & 24 & 0 & -12 & 6h \\ 6h & 2h^2 & 0 & 8h^2 & -6h & 2h^2 \\ 0 & 0 & -12 & -6h & 12 & -6h \\ 0 & 0 & 6h & 2h^2 & -6h & 4h^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_1' \\ u_2 \\ u_2' \\ u_3 \\ u_3' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ m_1 \\ f_2 \\ m_2 \\ f_3 \\ m_3 \end{pmatrix}$$

Z předchozí kapitoly víme, že vliv podloží je dán koeficienty, jež v obecném případě určíme ze vztahů $\int_{0}^{h} \tilde{q}(x) N_i^{(e)}(x) N_j^{(e)}(x) dx$. Ty vypočítáme pomocí numerické kvadratury, tj. položíme

$$\int_{0}^{h} \tilde{q}(x) N_i(x) N_j(x) dx \approx \sum_{k=1}^{Q} C_k \, \tilde{q}(\xi_k) N_i(\xi_k) N_j(\xi_k),$$

kde Q – počet bodů integrační formule,

 C_k – koeficienty integrační formule,

 ξ_k – integrační body dané formule.

S ohledem na to přispěje nyní *i*-tý řádek matice podloží \mathbf{K}_{P}^{e} do uvedené soustavy rovnic takto (*h* je délka podloží):

$$\int_{0}^{h} \tilde{q}(x)N_{i}(x)N_{1}(x)dx \, u_{2} + \int_{0}^{h} \tilde{q}(x)N_{i}(x)N_{2}(x)dx \, u_{2}' + \int_{0}^{h} \tilde{q}(x)N_{i}(x)N_{3}(x)dx \, u_{3} + \\ + \int_{0}^{h} \tilde{q}(x)N_{i}(x)N_{4}(x)dx \, u_{3}' = \\ = \int_{0}^{h} \tilde{q}(x) N_{i}(x) \left[N_{1}(x)u_{2} + N_{2}(x)u_{2}' + N_{3}(x)u_{3} + N_{4}(x)u_{3}'\right]dx \approx \\ \approx \sum_{k=1}^{Q} C_{k} \tilde{q}(\xi_{k}) N_{i}(\xi_{k}) \left[N_{1}(\xi_{k})u_{2} + N_{2}(\xi_{k})u_{2}' + N_{3}(\xi_{k})u_{3} + N_{4}(\xi_{k})u_{3}'\right] = \\ = \sum_{k=1}^{Q} C_{k} \tilde{q}(\xi_{k}) N_{i}(\xi_{k}) u_{h}(\xi_{k}).$$

36

Protože je

$$\tilde{q}(x) = \begin{cases} q(x) \text{ pro } u_h(x) > 0\\ 0 \text{ pro } u_h(x) \le 0 \end{cases}$$

bude opět účelné rozdělení soustavy nosník + podloží na dvě části. Rozdělit musíme jak uzlové hodnoty u_2 a u_3 , tak hodnoty v integračních bodech. Položíme pro každé $k = 1, \ldots, Q$

$$u_h(\xi_k) = v_k - w_k,$$

kde v_k je kladná
a w_k záporná část hodnoty funkce u_h v bod
ě $\xi_k.$ Dosazením dostaneme

$$\sum_{k=1}^{Q} C_k \, \tilde{q}(\xi_k) \, N_i(\xi_k) \, u_h(\xi_k) = q \, \sum_{k=1}^{Q} C_k N_i(\xi_k) \, v_k.$$

Tímto jsme schopni určit všechny koeficienty soustavy rovnic explicitně. Spojení obou částí soustavy zajistíme přidáním rovnic $u_h(\xi_k) - v_k + w_k = 0$, kde dosadíme za $u_h(\xi_k)$, tj.

$$N_{1}(\xi_{k}) u_{2} + N_{2}(\xi_{k}) u_{2}^{'} + N_{3}(\xi_{k}) u_{3} + N_{4}(\xi_{k}) u_{3}^{'} - v_{k} + w_{k} = 0.$$

Pokud jsme použili formule s integračními body v krajních bodech intervalu, nemusíme přidávat už žádné další neznámé ani rovnice. Zbývá rozhodnout, jakou kvadraturní formuli zvolit.

11 Gauss–Lobattova kvadratura

MKP používá z řady dobrých důvodů (viz např. [5] nebo [10]) Gaussovu kvadraturu, kterou lze obecně vyjádřit takto

$$\int_{a}^{b} v(x) \, dx \approx \sum_{k=1}^{Q} C_k \, v(\xi_k).$$

Vedle dobře známých "klasických" formulí existují ještě tzv. *Gauss–Lobattovy formule*, které příliš známé nejsou. Srovnání obou druhů formulí ukazuje následující přehled:

Gaussovy kvadraturní formule	Gauss–Lobattovy formule
přesné pro polynomy stupně	přesné pro polynomy stupně
2Q - 1	2Q - 3
Gaussovy body:	Lobattovy body:
kořeny Legendreových polynomů neobsahují koncové body	body extrémů Legendreových polynomů obsahují koncové body intervalu

S ohledem na poslední uvedenou vlastnost (a na to, co bylo uvedeno v předcházející kapitole) dáme přednost Gauss–Lobattovým formulím. Pro konkrétní představu si uveďme některé z nich v následující tabulce s integrací v intervalu [-1,1]

Q	2Q - 3	$\hat{\xi}_k$	C_k
2	1	± 1	1
3	3	± 1	$\frac{1}{3}$
		0	$\frac{1}{3}$
4	5	± 1	$\frac{1}{6}$
		$\pm \frac{\sqrt{5}}{5}$	$\frac{5}{6}$
5	7	± 1	$\frac{1}{10}$
		$\pm \frac{\sqrt{21}}{7}$	$\frac{49}{90}$
		0	$\frac{32}{45}$

Nyní můžeme pokračovat v příkladu z předcházející kapitoly. Z tabulky je zřejmé, že při výpočtu integrálu $\int_{0}^{h} \tilde{q}(x) N_i(x) u_h(x) dx$ dostáváme v případě tříbodové Gauss–Lobattovy kvadratury *přesnou integraci*, tj.

$$\int_{0}^{h} \tilde{q}(x) N_{i}(x) u_{h}(x) dx = q \sum_{k=1}^{3} C_{k} N_{i}(\xi_{k}) v_{k},$$

přičemž body ξ_k získáme transformací bodů $\hat{\xi}_k$ na interval [0, h]. Integrační body očíslujeme v "přirozeném pořadí", tj. zleva doprava. Levá strana soustavy pak bude vyhlížet takto (označili jsme $c = EI/h^3$, d = h/4, e = qh/12)

$$\begin{pmatrix} 12c & 6ch & -12c & 6ch & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 6ch & 4ch^2 & -6ch & 2ch^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -12c & -6ch & 24c & 0 & -12c & 6ch & 2e & e & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 6ch & 2ch^2 & 0 & 8ch^2 & -6ch & 2ch^2 & 0 & de & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -12c & -6ch & 12c & -6ch & 0 & e & 2e & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & ch & 1 & -d & 0 & -2 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & d & 1 & -d & 0 & -2 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \end{pmatrix}$$

a po symetrizaci

Je evidentní, že jsme dostali úlohu typu

nalézt vektory
$$\mathbf{u}$$
, $\mathbf{v} \ge \mathbf{w}$ tak, aby
 $\begin{pmatrix} \mathbf{R} & \mathbf{S}^T & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{S} & -\mathbf{D} & \mathbf{D} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{v} \\ \mathbf{w} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{o} \end{pmatrix}$
 \mathbf{mLCP}
 $\mathbf{v}^T \mathbf{w} = 0$
 \mathbf{v} , $\mathbf{w} \ge 0$

známou z kapitoly 5. Metody jejího řešení byly popsány v kapitolách 6 a 7.

Zásadní význam předvedeného postupu tkví v tom, že jsme úlohu NCP přidáním výpočetního uzlu ve středu prvku podloží a pomocí Gauss–Lobattovy kvadratury převedli na úlohu mLCP, která je znatelně snadněji řešitelná.

12 Vztah úloh komplementarity a optimalizace

Úlohy komplementarity nejsou pochopitelně úlohami optimalizačními. Existuje však mezi nimi úzký vztah, který se pokusíme v dalším předvést.

Uvažujme úlohu kvadratického programování

minimalizovat funkci $\frac{1}{2}\mathbf{z}^T\mathbf{M}\mathbf{z} + \mathbf{q}^T\mathbf{z}$ za podmínky $\mathbf{z} \ge \mathbf{o}$

Karush-Kuhn-Tuckerovy (zkráceně KKT) podmínky pro tuto úlohu mají tvar:

$$egin{aligned} \mathbf{M}\mathbf{z} + \mathbf{q} - oldsymbol{\lambda} = \mathbf{o} \ oldsymbol{\lambda}^T \mathbf{z} &= 0 \ \mathbf{z}, \, oldsymbol{\lambda} \geq \mathbf{o} \end{aligned}$$

což ovšem představuje úlohu LCP.

Podobně pro obecnější úlohu nelineárního programování

minimalizovat funkci $F(\mathbf{z})$ za podmínky $\mathbf{z} \ge \mathbf{o}$

jsou KKT podmínky:

$$abla F(\mathbf{z}) - \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{o}$$

 $\boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{z} = 0$
 $\mathbf{z}, \, \boldsymbol{\lambda} \ge \mathbf{o}$

Dostali jsme úlohu NCP.

Konečně pozměňme první úlohu

$$\begin{array}{c} \text{minimalizovat funkci} \quad \frac{1}{2} \mathbf{z}^T \mathbf{M} \mathbf{z} + \mathbf{q}^T \mathbf{z} \\ \text{za podmínky} \quad \mathbf{v} \geq \mathbf{o} \end{array} \\ \text{zadáním} \quad \mathbf{M} = \begin{pmatrix} \mathbf{R} \ \mathbf{S}^T \\ \mathbf{S} \ \mathbf{T}, \end{pmatrix}, \ \mathbf{z} = \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{v}, \end{pmatrix}, \ \mathbf{q} = \begin{pmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{g} \end{pmatrix} \end{array}$$

KKT podmínky v tomto případě vyhlížejí takto:

$$Ru + STv + f = o$$

$$Su + Tv + g = \lambda$$

$$vT\lambda = 0$$

$$v, \lambda \ge o$$

což je zadání smíšeného problému mLCP.

Připomeňme, že KKT podmínky plně charakterizují příslušnou úlohu optimalizace pouze v konvexních případech.

Existují i další zajímavé možnosti vztahu úloh komplementarity a optimalizace. Nebudeme je zde však uvádět a odkážeme např. na [7].

13 Závěrečná poznámka o pružinách

Nakonec se ještě pokusíme odpovědět na vcelku přirozenou otázku. Je-li Winklerovo podloží složeno z (nekonečně) mnoha pružin, je možné to nějak použít k řešení úloh s tímto podložím?

Uvažujme znovu dříve uvedené příklady, které teď formálně spojíme do jednoho náčrtku:



Nejprve se zaměříme na případ bez podloží, jen s 2 pružinami. Jak jsme již ukázali výše, vliv pružin se projeví přičtením jejich tuhostí na odpovídající pozice v celkové matici tuhosti:

$$\underbrace{EI}_{h^3} \begin{pmatrix} 12 & 6h & -12 & 6h & 0 & 0\\ 6h & 4h^2 & -6h & 2h^2 & 0 & 0\\ -12 & -6h & \boxed{24} & 0 & -12 & 6h\\ 6h & 2h^2 & 0 & 8h^2 & -6h & 2h^2\\ 0 & 0 & -12 & -6h & \boxed{12} & -6h\\ 0 & 0 & 6h & 2h^2 & -6h & 4h^2 \end{pmatrix}$$

Na podkladě této úvahy se někdy v nematematické literatuře objevuje tzv. "pružinový prvek"

$$q \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Ten je ovšem vytvořen nesprávně, neboť neumožňuje obvyklé skládání prvků do celkové matice tuhosti, což je ihned vidět v případě, že přidáme pružinu i do levého krajního uzlu našeho příkladu.

O náhradě Winklerova podloží pomocí velkého počtu pružin se některé publikace určené inženýrům zmiňují, autorům příspěvku však není znám důkaz konvergence takové aproximace.

Pružiny se v standardních konečně-prvkových výpočtech umísťují vždy do uzlů. S ohledem na no, jak vypadá konečný prvek $K_P^{(e)}$ pro Winklerovo podloží, nemusí být pro účel výše zmiňované aproximace tento způsob nejvhodnější. V této souvislosti zajímavou a dosud, pokud je autorům známo, nikde neuvedenou možností je konstrukce pružinového prvku s pružinou umístěnou uvnitř prvku. Nejpřirozenější je zřejmě volba s pružinou uprostřed elementu. V tomto případě určíme prvky matice elementu pomocí vztahů $(\mathbf{K}_p)_{ij} = q N_i(0) N_j(0)$ a pružinový prvek pak vyhlíží takto

$$\mathbf{K}_{p} = \frac{q}{64} \begin{pmatrix} 16 & 4h & 16 & -4h \\ 4h & h^{2} & 4h & -h^{2} \\ 16 & 4h & 16 & -4h \\ -4h & -h^{2} & -4h & h^{2} \end{pmatrix}.$$

Nově vytvořený prvek je – oproti výše uvedenému prvku – vytvořen korektně, neboť umožňuje v MKP obvyklé sestavování matic. Může být také použit pro výpočet založený na algoritmu typu prediktor–korektor.

Předpokládejme rozdělení podloží na dostatečně velký počet malých pružinových elementů. Jestliže dojde ke stlačení pružiny uprostřed, budeme pak považovat za stlačený celý element. Rámcové schema výpočtu je následující:

- predikce výpočet indikující stlačení jednotlivých pružin
- korekce prostřednictvím výpočtu s prvky Winklerova podloží

I když byl takový postup už svého času autory vyzkoušen, přednost zaslouží metody popsané v dřívějších kapitolách.

Poslední poznámka se týká interpretace použití integračních formulí při výpočtu úloh s podložím. Prováděné numerické integrace se rozkládají do součtu funkčních hodnot ve zvolených integračních bodech násobených nějakými koeficienty (viz kapitoly 10 a 11). V případě, že nosník v daném místě stlačuje podloží, je příslušný příspěvek započítán do celkového součtu, v opačném případě započítán není. To svádí k fyzikální interpretaci založené na tom, že v integračních bodech působí jakési pružiny, které se aktivují nebo ne. Srovnáním pružinového prvku např. s tříbodovou Gauss–Lobattovou kvadraturou však jasně ukazuje, že příslušné rovnice se liší. Je proto vhodnější nahlížet na integrační body kupříkladu jako na *testovací body* výpočtu.

Literatura

- Bonnans, J. F., Gilbert, J. Ch., Lemaréchal, C., Sagastizábal, C. A.: Numerical Optimization. Theoretical and Practical Aspects. Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, 2003.
- [2] Forsgren, A., Gill, P. E., Wright, M. A.: Interior methods for nonlinear optimization. SIAM Review 44, 4 (2002), 525–597.
- [3] Horák, J., Netuka, H.: Matematický model třídy nelineárních podloží Winklerovského typu: I. Spojitý případ. Nečtiny, 2005.
- [4] Kolář, V., Kratochvíl, J., Leitner, F., Ženíšek, A.: Výpočet plošných a prostorových konstrukcí metodou konečných prvků. SNTL, Praha, 1979.
- [5] Křížek, M., Neittaanmäki, P.: Finite Element Approximation of Variational Problems and Applications. Longman Scientific & Technical, Harlow; copublished in the United States with John Wiley & Sons, New York, 1990.
- [6] Mangasarian, O. L.: Solution of symmetric linear complementarity problems by iterative methods. Journal of Optimization Theory and Applications 22, 4 (1977), 465–485.
- [7] Murty, K. G.: Linear Complementarity, Linear and Nonlinear Programming. Helderman-Verlag, Berlin, 1988.
- [8] Netuka, H., Horák, J.: Matematický model třídy nelineárních podloží Winklerovského typu: II. Diskrétní případ. Nečtiny, 2005.
- [9] Potra, F. A., Wright, S. J.: Interior-point methods. Journal of Computational and Applied Mathematics 124 (2000), 281–302.
- [10] Reddy, J. N.: An Introduction to the Finite Element Method. McGraw-Hill Book Co., New York, 1984.
- [11] Sysala, S.: Unilateral elastic subsoil of Winkler's type: Semi-coercive beam problem.
- [12] Vanderbei, R. J.: Linear Programming: Foundations and Extensions. Kluwer Academic, Dordrecht, 2001 (second edition).
- [13] Winkler, E.: Die Lehre von der Elastizität und Festigkeit. Dominicus, Prag, 1867.

O jedné třídě nehladkých funkcí *

DUŠAN BEDNAŘÍK¹, KAREL PASTOR²

¹Katedra matematiky, Univerzita Hradec Králové Rokitanského 62, 500 03 Hradec Králové, Česká republika e-mail: dbednarik@seznam.cz
²Katedra matematické analýzy a aplikací matematiky Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého Tomkova 40, 779 00 Olomouc, Česká republika e-mail: pastor@inf.upol.cz

Abstrakt

Smyslem příspěvku je podat přehled o dosud známých vlastnostech funkcí, které jsou tzv. ℓ -stabilní v nějakém bodě. Tyto funkce představují jisté zobecnění třídy $C^{1,1}$ -funkcí (tj. funkcí s lokálně lipschitzovskou derivací).

1 Motivace

Uveďme na počátku dobře známou větu klasické analýzy.

Věta 1 Nechť $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ je funkce třídy C^2 a $x \in \mathbb{R}^n$. Jestliže f'(x) = 0 a

$$f^2(x;h,h) := \lim_{t \to 0} \frac{f'(x+th)h - f'(x)h}{t} > 0, \quad \forall h \in S_{\mathbb{R}^n},$$

pak funkce f má v bodě x izolované minimum druhého řádu.

^{*}Podpořeno Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy (MSM 6198959214).

Funkce nabývá izolované minimum druhého řádu v případě, že příslušné ostré lokální minimum splňuje navíc podmínku obsaženou v následující definici.

Definice 1 Nechť X je normovaný lineární prostor. Řekneme, že bod $x \in X$ je *izolovaným minimem druhého řádu pro funkci* $f : X \to \mathbb{R}$, jestliže existují okolí U bodu x a A > 0 tak, že

$$f(y) - f(x) \ge A ||y - x||^2, \quad \forall y \in U.$$

Spolu s rozvojem nelineární analýzy přibližně od 70. let minulého století se začaly objevovat snahy zobecnit Větu 1 pro méně hladké funkce pomocí zobecněných derivací (viz např. [BZ, CC, CHN, BP1, GGR]).

Optimalizační podmínka uvedená v článku I. Gincheva, A. Guerraggia a M. Roccy předčila předchozí dosažené výsledky. Byla vyslovena pro třídu $C^{1,1}$ funkcí, tj. třídu diferencovatelných funkcí s lipschitzovskou první derivací, které poprvé věnovali pozornost J. B. Hiriart-Urruty, J. J. Strodiot a H. V. Nguyen. Potřeba zavedení těchto funkcí vyplynula ze skutečnosti, že v některých problémech aplikované matematiky, jež zahrnují např. variační rovnice, semidefinitní programování nebo penalizaci funkcí, se vyskytují jednou diferencovatelné funkce, jež nemusí být diferencovatelné dvakrát.

Věta 2 [GGR] Nechť $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ je $C^{1,1}$ funkcí v nějakém okolí bodu $x \in \mathbb{R}^n$. Jestliže f'(x) = 0 a

$$f_P^{\prime \ell}(x;h) = \liminf_{t \downarrow 0} \frac{f(x+th) - f(x) - tf'(x)h}{t^2/2} > 0, \quad \forall h \in S_{\mathbb{R}^n},$$

pak x je izolovaným minimem druhého řádu pro funkci f.

Italští matematici D. L. Torre a M. Rocca ve své dřívější publikaci [TR] ukázali, že pro $C^{1,1}$ funkce je možné porovnat Peanovu zobecněnou derivaci $f_P^{\ell}(x;h)$ a Diniho zobecněnou derivaci $f_D^{\ell}(x;h)$ následovně:

$$f_P^{\prime \ell}(x;h) \ge f_D^{\prime \ell}(x;h) := \liminf_{t \downarrow 0} \frac{f'(x+th)h - f'(x)h}{t}.$$

Následující příklad převzatý a podrobněji rozebraný v [BP2] ukazuje, že předchozí nerovnost může být i ostrá. To např. znamená, že optimalizační podmínka vyslovená ve Větě 2 zasluhuje přednost oproti podmínce uvedené v [BP1].

Příklad 1 Uvažujme funkci

$$f(x) = \begin{cases} \int_0^{|x|} t(\frac{19}{20} + \sin \ln t) dt, & \text{je-li } x \neq 0, \\ 0, & \text{je-li } x = 0. \end{cases}$$

f je $C^{1,1}$ funkcí, protože $f'(x)h = x((19/20) + \sin(\ln|x|))h$ pro $x \neq 0, h \in \mathbb{R},$ af'(0) = 0. Přitom

$$f_P^{\prime\ell}(0;1) = f_P^{\prime\ell}(0;-1) = \frac{19}{20} + \frac{2}{5}(-\sqrt{5}) > 0.$$

Na druhou stranu však platí

$$f_D^{\prime\prime}(0;1) = (19/20) - 1 < 0.$$

V článku [GGR] byla vyslovena otázka, zda a jakým způsobem můžeme zeslabit $C^{1,1}$ -regularitu ve Větě 2. Ukázalo se, že místo $C^{1,1}$ funkcí stačí uvažovat tzv. ℓ -stabilní funkce. Připomeňme ještě nejprve definici dolní Diniho směrové derivace skalární funkce f definované na lineárním normovaném prostoru v bodě x a ve směru h:

$$f^{\ell}(x;h) = \liminf_{t \downarrow 0} \frac{f(x+th) - f(x)}{t}.$$

Definice 2 Řekneme, že funkce $f : X \to \mathbb{R}$ je ℓ -stabilní v bodě $x \in X$, jestliže existují okolí U bodu x a K > 0 tak, že

$$|f^{\ell}(y;h) - f^{\ell}(x;h)| \le K ||y - x||, \quad \forall y \in U, \forall h \in S_X.$$

Věta 3 [BP2] Nechť $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ je je ℓ -stabilní v bodě x. Jestliže f'(x) = 0 a

$$f_P^{\prime\ell}(x;h) > 0, \quad \forall h \in S_{\mathbb{R}^N},$$

pak x je izolované minimum druhého řádu pro funkci f.

Jelikož každá funkce, která splňuje $C^{1,1}$ vlastnost v okolí nějakého bodu, je v tomto bodě ℓ -stabilní, Věta 3 je zobecněním Věty 2. Na závěr této kapitoly uveďme příklad funkce studovaný v [BP2], pro kterou je možné stranovit existenci izolovaného minimizéru 2. řádu pomocí Věty 3, ale ne pomocí Věty 2.

Příklad 2 Uvažujme posloupnost $a_n = 1/n$, n = 1, 2, ... Definujme pomocnou funkci $\varphi : [0, \infty) \to R$ následujícím způsobem.

$$\varphi(u) = \begin{cases} a_1, & \text{pro } u > a_1, \\ \frac{a_n^2 - a_{n+1}}{a_n - a_{n+1}} (u - a_{n+1}) + a_{n+1}, & \text{pro } u \in (a_{n+1}, a_n], \\ 0, & \text{pro } u = 0. \end{cases}$$



Nyní definujme funkci $f: R \to R$:

$$f(x) := \int_0^{|x|} \varphi(u) du, \quad x \in R.$$

Funkce f není diferencovatelná v žádném okolí 0, nelze využít Věty 2. Na druhou stranu, funkce f je ℓ -stabilní v tomto bodě a všechny předpoklady Věty 3 jsou splněny, tedy funkce f má v bodě x izolované minimum druhého řádu.

2 Vlastnosti ℓ -stabilních skalárních funkcí

V této kapitole podáme přehled některých vlastností funkcí, které jsou ℓ -stabilní v nějakém bodě. Některé důkazy uvedených tvrzení již prošla recenzním řízením, jiná jím teprve procházejí.

Překvapivě hodně práce dal důkaz následující věty (jedná se o důkaz na téměř 10 stran) a autoři si proto dovolují vyslovit dotaz, zda je možné tvrzení dokázat nějak jednodušeji.

Věta 4 [BP4] Nechť $f : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$ je ℓ -stabilní funkce v bodě $x \in \mathbb{R}^N$. Potom f je spojitá na nějakém okolí bodu x.

Vzhledem k tomu, že na prostoru nekonečné dimenze existují funkce, které jsou lineární, a tudíž ℓ -stabilní v každém bodě uvažovaného prostoru, ale které nejsou spojité, není možné předchozí větu zobecnit pro nekonečnou dimenzi.

Věta 5 [BP3] Nechť $f : X \to \mathbb{R}$ je spojitá funkce na okolí bodu $x \in X$ a nechť f je ℓ -stabilní v x. Potom f je lipschitzovská na okolí x.

Pro Asplundovy prostory, jejichž definici připomeneme a o kterých je možné se dočíst např. v [Ph], můžeme pomocí Preissovy věty ukázat, že ℓ -stabilita v bodě má za následek ostrou diferencovatelnost v uvažovaném bodě.

Definice 3 Banachův prostor X se nazývá Asplundův, jestliže každá spojitá konvexní funkce definovaná na neprázdné otevřené konvexní množině $D \subset X$ je frechetovsky diferencovatelná na husté G_{δ} podmnožině D.

Věta 6 [Pr] Každá lokálně lipschitzovská reálná funkce definovaná na Asplundově prostoru je frechetovsky diferencovatelná na husté množině.

Věta 7 [BP3] Nechť X je Asplundův prostor, $f : X \to \mathbb{R}$ je spojitá funkce na okolí $x \in X$, která je ℓ -stabilní v x. Potom f je ostře diferencovatelná v bodě x.

Připomeňme, že funkce $f : X \to \mathbb{R}$ je ostře diferencovatelná v bodě x, pokud pro derivaci f'(x) funkce f v bodě x platí, že

$$f'(x)h = \lim_{y \to x, t \downarrow 0} \frac{f(y+th) - f(y)}{t}, \quad \forall h \in S_X,$$

a tato konvergence je stejnoměrná vzhledem k $h \in S_X$.

Vzniká přirozená otázka, jaký je vztah mezi třídou ℓ -stabilních funkcích v bodě a třídou funkcí, jejichž stabilita je dána pomocí horní Diniho směrové derivace

$$f^{u}(x;h) = \limsup_{t \downarrow 0} \frac{f(x+th) - f(x)}{t}$$

Definice 4 Nechť X je normovaný lineární prostor. Řekneme, že funkce $f : X \to \mathbb{R}$ je *u-stabilní v bodě* $x \in X$, jestliže existují okolí U bodu x a K > 0 tak, že

$$|f^{u}(y;h) - f^{u}(x;h)| \le K ||y - x||, \quad \forall y \in U, \forall h \in S_X$$

Věta 8 [BP3] Nechť X je normovaný lineární prostor a nechť $f : X \to \mathbb{R}$ je spojitá funkce na okolí bodu $x \in X$. Funkce f je ℓ -stabilní v bodě x právě tehdy, když je v tomto bodě u-stabilní.

Na závěr přehledu vlastností skalárních funkcí, které jsou ℓ -stabilní v nějakém bodě, uveďme, že vlastnost ℓ -stability v bodě se zachovává při skládání v následujícím smyslu.

Věta 9 [BP3] Nechť $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ je ℓ -stabilní v bodě $x \in \mathbb{R}^n$, a nechť funkce $g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ je ℓ -stabilní v bodě y = f(x). Potom je také funkce $g \circ f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ ℓ -stabilní v bodě x.

3 Optimalizace v nekonečné dimenzi

Zabývejme se nyní možným zobecněním Věty 3 pro skalární funkce definované na prostoru nekonečné dimenze. Připomeňme větu z klasické analýzy.

Věta 10 Nechť $f: X \to \mathbb{R}$ je funkce třídy C^2 a $x \in X$. Jestliže f'(x) = 0, funkce f má frechetovskou druhou derivaci a existuje c > 0 tak, že platí

$$f^2(x;h,h) \ge c, \quad \forall h \in S_X,$$

pak funkce f má v bodě x izolované minimum druhého řádu.

S ohledem na Větu 10 se zdá být přirozené uvažovat frechetovský přístup také u Peanovy zobecněné derivace.

Definice 5 Nechť $f: X \to \mathbb{R}$ je funkce, a nechť $x \in X$. Řekneme, že $f_P^{\ell}(x; \cdot)$ je frechetovská, jestliže pro každé $\varepsilon > 0$ existuje $\delta > 0$ tak, že pro každé $h \in S_X$ a pro každé $0 < t < \delta$ platí

1. $f_P^{\prime\ell}(x;h) - \frac{2}{t^2}(f(x+th) - f(x) - tf'(x)h) < \varepsilon$, je-li $f_P^{\prime\ell}(x;h) < +\infty$. 2. $\frac{2}{t^2}(f(x+th) - f(x) - tf'(x)h) > \frac{1}{\varepsilon}$, je-li $f_P^{\prime\ell}(x;h) = +\infty$.

Věta 11 [BP4] Nechť $f : X \to \mathbb{R}$ je funkce, $x \in X$, a nechť c > 0. Jestliže $f'(x) = 0, f_P'^{\ell}(x; \cdot)$ je frechetovská, a

$$f_P^{\prime\prime}(x;h) \ge c, \quad \forall h \in S_X,$$

pak funkce f má v bodě x izolované minimum druhého řádu.

Důkaz Věty 11 je poměrně velmi snadný. Podstatně více práce si vyžádalo dokázání následujícího poznatku.

Věta 12 [BP4] Nechť $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ je funkce ℓ -stabilní v bodě $x \in \mathbb{R}^n$. Jestliže f'(x) = 0, pak $f_P'^{\ell}(x; \cdot)$ je frechetovská.

Věta 11 je tak podle předchozí věty zobecněním Věty 3 pro funkce definované na prostorech nekonečné dimenze.

4 Vektorová optimalizace

V závěrečné kapitole našeho příspěvku bychom chtěli prezentovat zobecnění Věty 3 pro vektorové funkce. Nejprve připomeneme několik základních pojmů z vektorové optimalizace.

Množina $C \subset \mathbb{R}^n$ se nazývá kužel, jestliže

$$x \in C, \ \lambda \ge 0 \Longrightarrow \lambda x \in C.$$

Kužel se nazývá ostrý (pointed), jestliže

$$C \cap (-C) = \{0_{\mathbb{R}^n}\}.$$

Jestliže $C \subset \mathbb{R}^n$ je kužel, pak označujeme

$$C' = \{ \xi \in \mathbb{R}^n; \langle \xi, y \rangle \ge 0, \forall y \in C \},$$

$$\Gamma = C' \cap S_{\mathbb{R}^n},$$

$$C'' = (C')' = \{ y \in \mathbb{R}^n; \langle \xi, y \rangle \ge 0, \xi \in C' \}.$$

Věta 13 [Ja] Jestliže C je neprázdný, uzavřený, konvexní a ostrý kužel s neprázdným vnitřkem, pak

- a) C' je také neprázdný, uzavřený, konvexní a ostrý kužel s neprázdným vnitřkem;
- b) pro každé $y \in C \setminus \{0\}, \xi \in int C', plati \langle \xi, y \rangle > 0;$
- c) C = C''.

Příklad 3 Je-li

$$C = \{(x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n; x_i \ge 0 \text{ pro } i = 1, \dots, n\},\$$

pak C' = C.

Definice 6 Nechť $C \subset \mathbb{R}^n$ je neprázdný, uzavřený, konvexní a ostrý kužel s neprázdným vnitřkem. Řekneme, že $f : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^n$ má v bodě x izolované minimum druhého řádu, jestliže existuje okolí U bodu x a konstanta A > 0 tak, že

$$y \in U \Longrightarrow \sup_{\xi \in \Gamma} (\langle \xi, f(y) - f(x) \rangle) \ge A ||y - x||^2.$$

Přistupme nyní ke zobecnění pojmu $\ell\text{-stabilní}$ funkce pro vektorové funkce.

Definice 7 Nechť $f: \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^n$ je zobrazení, a nechť $x, h \in \mathbb{R}^m$ a $\xi \in \mathbb{R}^n$. Pak definujeme

$$f^{\ell}(x;h)(\xi) = \liminf_{t\downarrow 0} \frac{\langle \xi, f(x+th) - f(x) \rangle}{t}.$$

Zobrazení f se nazývá ℓ -stabilní v bodě x, jestliže existuje okolí U bodu x a konstanta K > 0 tak, že

$$y \in U, h \in S_{\mathbb{R}^m}, \xi \in \Gamma \Longrightarrow |f^{\ell}(y;h)(\xi) - f^{\ell}(x,h)(\xi)| \le K ||y - x||.$$

Pro vektorové funkce, které jsou ℓ -stabilní v nějakém bodě, můžeme vyslovit některé analogie tvrzení uvedené v kapitole 2 pro skalární funkce.

Věta 14 [BP4] Nechť $f : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^n$ je ℓ -stabilní v bodě x. Potom f je lipschitzovská funkce na nějakém okolí bodu x a je v bodě x ostře diferencovatelná.

Věta 15 [BP4] Nechť $f : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^n$ je ℓ -stabilní v bodě $x \in \mathbb{R}^m$, a nechť funkce $g : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^p$ je ℓ -stabilní v bodě y = f(x). Potom je také funkce $g \circ f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ ℓ -stabilní v bodě x.

Pro zobrazení $f : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^n$, které je diferencovatelná v bodě $x \in \mathbb{R}^m$ a pro $h \in \mathbb{R}^m$ definujeme

$$f_{P,V}''(x;h) := \operatorname{Limsup}_{t\downarrow 0} \frac{2}{t^2} (f(x+th) - f(x) - tf'(x)h)$$

$$:= \left\{ y \in \mathbb{R}^m : \exists \{t_k\}_{k=1}^\infty : t_k \downarrow 0, \frac{2}{t_k^2} (f(x+t_kh) - f(x) - t_kf'(x)h) \to y \right\}.$$

Věta 16 [BP4] Nechť funkce $f : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^n$ je ℓ -stabilní v bodě x a nechť $\Delta(x) := \{\xi \in \mathbb{R}^n : \xi f'(x) = 0, \|\xi\| = 1\} \cap C' \neq \emptyset$. Předpokládejme, že pro každé $h \in S_{\mathbb{R}^m}$ je splněna jedna z následujících dvou podmínek:

(i) $f'(x)h \notin -C$, (ii) $f'(x)h \in -(C \setminus int C)$

$$\min_{y \in f_{P,V}''(x;h)} \max\{\langle \xi, y \rangle : \xi \in \triangle(x) \cap C'\} > 0.$$

Potom x je izolované minimum druhého řádu pro f.

Literatura

a

- [BP1] Bednařík, D., Pastor, K.: Elimination of strict convergence in optimization. SIAM J. Control Optim. 43, 3 (2004), 1063–1077.
- [BP2] Bednařík, D., Pastor, K.: On second-order conditions in unconstrained optimization. přijato k publikaci v Math. Program.
- [BP3] Bednařík, D., Pastor, K.: Differentiability properties of functions that are l-stable at a point. Nonlinear analysis (2007), doi:10.1016/j.na.2007.09.006.
- [BP4] Bednařík, D., Pastor, K.: Poznámky o l-stabilních funkcích. v přípravě.
- [BZ] Ben-Tal, A., Zowe, J.: Directional derivatives in nonsmooth optimization. J. Optim. Theory Appl. 47 (1985), 483–490.
- [CC] Cominetti, R., Correa, R.: A generalized second-order derivative in nonsmooth optimization. SIAM J. Control Optim. 28 (1990), 789–809.
- [CHN] Chan, W. L., Huang, L. R., Ng, K. F.: On generalized second-order derivatives and Taylor expansions in nonsmooth optimization. SIAM J. Control Optim. 32 (1994), 591– 611.
- [GGR] Ginchev, I., Guerraggio, A., Rocca, M.: From scalar to vector optimization. Appl. Math. 51 (2006), 5–36.

- [HSN] Hiriart-Urruty, J. B., Strodiot, J. J., Nguyen, V. H.: Generalized Hessian matrix and second-order optimality conditions for problems with C^{1,1} data. Appl. Math. Optim. 11 (1984), 43–56.
- [Ja] Jahn, J.: Vector Optimization. Springer-Verlag, New York, 2004.
- [Ph] Phelps, R.R.: Convex Functions, Monotone Operators and Differentiability. Springer-Verlag, Berlin, 1993.
- [Pr] Preiss, D.: Fréchet derivatives of Lipschitz functions. J. Funct. Analysis 91 (1990), 312– 345.
- [TR] Torre, D. L., Rocca, M.: Remarks on second order generalized derivatives for differentiable functions with Lipschitzian jacobian. Applied Mathematics E-Notes 3 (2003), 130–137.