Stabilní a rychlé numerické metody pro řešení náročných inženýrských úloh

Ph.D. akademie, 18. listopadu 2022, FEI VŠB-TU Ostrava

Dalibor Lukáš

Katedra aplikované matematiky, FEI
VŠB-TU Ostrava

web: http://homel.vsb.cz/∼luk76
email: dalibor.lukas@vsb.cz

VŠB TECHNICKÁ UNIVERZITA OSTRAVA | FAKULTA ELEKTROTECHNIKY A INFORMATIKY | KATEDRA APLIKOVANÉ MATEMATIKY

Stabilní a rychlé numerické metody pro řešení náročných inženýrských úloh

Osnova kurzu

1. Soustavy lineárních rovnic
2. Interpolace a numerická integrace
3. Aproximace metodou nejmenších čtverců, FFT
4. Obyčejné a parciální diferenciální rovnice metodami konečných a hraničních prvků

Stabilní a rychlé numerické metody
pro řešení náročných inženýrských úloh

Osnova 3. přednášky: Aproximace metodou nejmenších čtverců, FFT

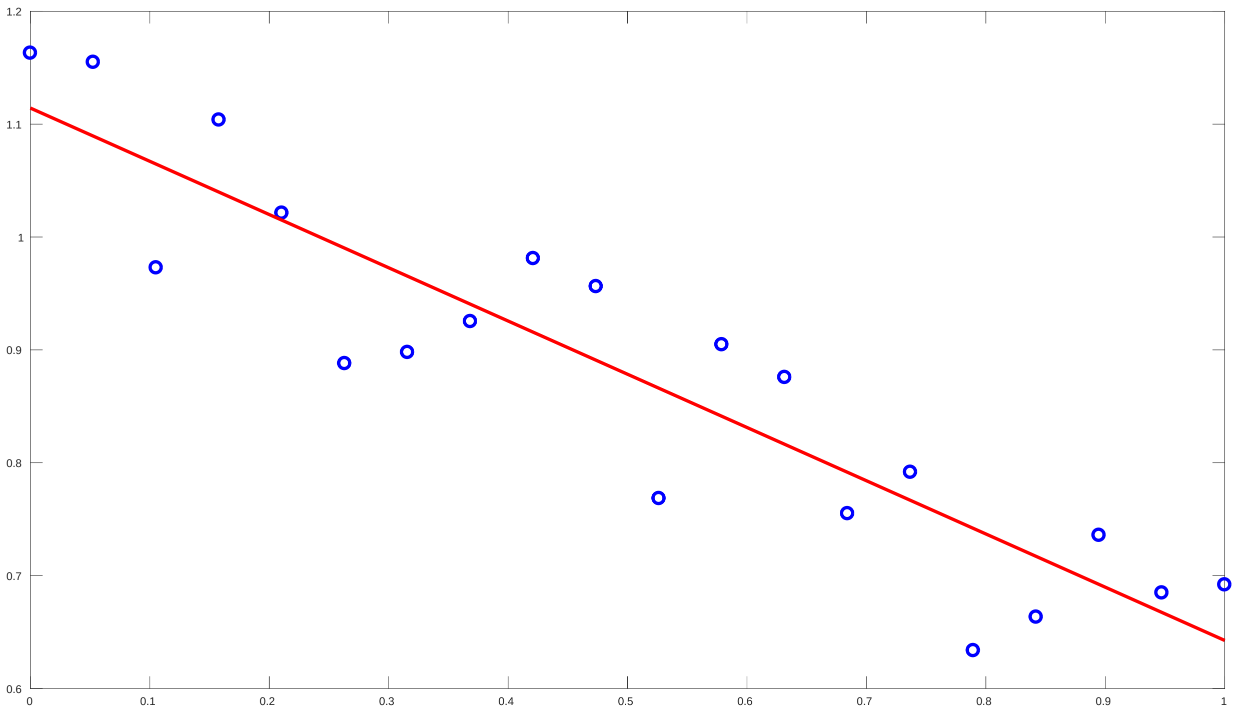
- Metoda nejmenších čtverců konkrétně
- Metoda nejmenších čtverců abstraktně
- Metoda nejmenších čtverců stabilně a rychle
- Rychlá Fourierova transformace
- Spektrální metody řešení diferenciálních rovnic

Metoda nejmenších čtverců konkrétně

Lineární regrese

Proložme $(x_0, y_0), \ldots, (x_m, y_m) \in \mathbb{R}^2$, kde $m \gg 1$ a $x_i \neq x_j$ pro $i \neq j$ lineární funkcí

$$f_1(x) := \alpha_0 + \alpha_1 x := \operatorname*{arg\,min}_{\beta_0, \beta_1 \in \mathbb{R}} \sum_{i=0}^{m} (\beta_0 + \beta_1 x_i - y_i)^2 .$$



Metoda nejmenších čtverců konkrétně

Lineární regrese

Jedná se o minimalizaci kvadratické funkce tzv. kvadratické programování,

$$\varphi(\boldsymbol{\beta}) := \sum_{i=0}^{m} (\beta_0 + \beta_1 \, x_i - y_i)^2 = c - 2\,\mathbf{b}^T \cdot \boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\beta}^T \cdot \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\beta},$$

kde

$$c := \sum_{i=0}^{m} (y_i)^2, \quad \mathbf{b} := \begin{pmatrix} \sum\limits_{i=0}^{m} y_i \\ \sum\limits_{i=0}^{m} x_i \, y_i \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A} := \begin{pmatrix} m+1 & \sum\limits_{i=0}^{m} x_i \\ \sum\limits_{i=0}^{m} x_i & \sum\limits_{i=0}^{m} (x_i)^2 \end{pmatrix}.$$

Úloha je ekvivalentní řešení soustavy 2 lineárních rovnic o 2 neznámých,

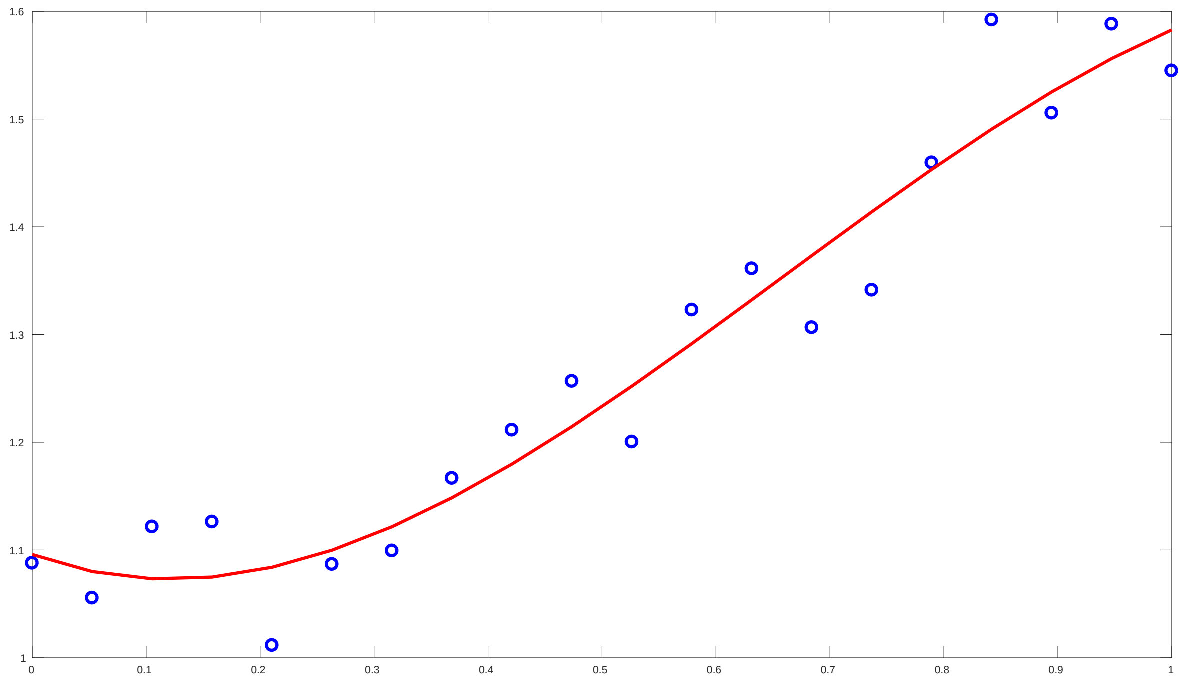
$$\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\alpha} = \mathbf{b}.$$

Metoda nejmenších čtverců konkrétně

Polynomiální regrese

Proložme $(x_0, y_0), \dots, (x_m, y_m) \in \mathbb{R}^2$, kde $m \gg n$ a $x_i \neq x_j$ pro $i \neq j$ polynomem

$$f_n(x) := \sum_{j=0}^{n} \alpha_j\, x^j := \arg\min_{\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^{n+1}} \sum_{i=0}^{m} \left(\sum_{j=0}^{n} \beta_j\, x^j - y_i \right)^2 .$$



Metoda nejmenších čtverců konkrétně

Polynomiální regrese

Opět se jedná o minimalizaci kvadratické funkce tzv. kvadratické programování,

$$\varphi(\boldsymbol{\beta}) := \sum_{i=0}^{m} \left(\sum_{j=0}^{n} \beta_j \, x^j - y_i \right)^2 = c - 2\,\mathbf{b}^T \cdot \boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\beta}^T \cdot \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\beta},$$

kde

$$c := \sum_{i=0}^{m} (y_i)^2, \quad \mathbf{b} := \begin{pmatrix} \sum\limits_{i=0}^{m} y_i \\ \sum\limits_{i=0}^{m} x_i \, y_i \\ \vdots \\ \sum\limits_{i=0}^{m} (x_i)^n \, y_i \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A} := \begin{pmatrix} m+1 & \sum\limits_{i=0}^{m} x_i & \dots & \sum\limits_{i=0}^{m} (x_i)^n \\ \sum\limits_{i=0}^{m} x_i & \sum\limits_{i=0}^{m} (x_i)^2 & \dots & \sum\limits_{i=0}^{m} (x_i)^{n+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum\limits_{i=0}^{m} (x_i)^n & \sum\limits_{i=0}^{m} (x_i)^{n+1} & \dots & \sum_{i=0}^{m} (x_i)^{2n} \end{pmatrix}.$$

Úloha je ekvivalentní řešení soustavy $n+1$ lineárních rovnic o $n+1$ neznámých,

$$\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\alpha} = \mathbf{b}.$$

Metoda nejmenších čtverců konkrétně

Řešení přeurčených soustav lineárních rovnic

Soustava m lineárních rovnic o n neznámých

$$\widehat{\mathbf{A}} \cdot \boldsymbol{\alpha} = \widehat{\mathbf{b}}$$

nemá řešení, právě když

$$\widehat{\mathbf{b}} \notin \mathcal{H}(\widehat{\mathbf{A}}) := \{\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\beta} : \ \boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^n\}\,.$$

Metoda nejmenších čtverců je ekvivalentní ortogonální projekci $\widehat{\mathbf{b}}$ na $\mathcal{H}(\widehat{\mathbf{A}})$,

$$\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\alpha} = \mathbf{b},$$

kde $\mathbf{A} := \widehat{\mathbf{A}}^T \cdot \widehat{\mathbf{A}}$ a $\mathbf{b} := \widehat{\mathbf{A}}^T \cdot \widehat{\mathbf{b}}$.

Polynomiální regrese jako přeurčená soustava

$$\begin{array}{rcl} \alpha_0 + \alpha_1\, x_0 + \cdots + \alpha_n\, (x_0)^n & = & y_0 \\ & \vdots & \\ \alpha_0 + \alpha_1\, x_m + \cdots + \alpha_n\, (x_m)^n & = & y_m \end{array} \quad \Longleftrightarrow \quad \widehat{\mathbf{A}} := \begin{pmatrix} 1 & x_0 & \dots & (x_0)^n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_m & \dots & (x_m)^n \end{pmatrix}, \quad \widehat{\mathbf{b}} := \begin{pmatrix} y_0 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix}$$

Stabilní a rychlé numerické metody pro řešení náročných inženýrských úloh

Osnova 3. přednášky: Aproximace metodou nejmenších čtverců, FFT

- Metoda nejmenších čtverců konkrétně
- Metoda nejmenších čtverců abstraktně
- Metoda nejmenších čtverců stabilně a rychle
- Rychlá Fourierova transformace
- Spektrální metody řešení diferenciálních rovnic

Metoda nejmenších čtverců abstraktně

Ortogonální projekce dat do podprostoru

Mějme vektorový prostor V se skalárním součinem $(.,.)$ a podprostor konečné dimenze

$$V_n := \langle \boldsymbol{\varphi}_0, \boldsymbol{\varphi}_1, \dots, \boldsymbol{\varphi}_n \rangle.$$

Je dán prvek (data) $\mathbf{u} \in V$. Hledáme jeho ortogonální projekci na V_n:

$$\mathbf{u}_n = \sum_{j=0}^{n} \alpha_j \, \boldsymbol{\varphi}_j := \operatorname*{arg\,min}_{\mathbf{v}_n := \sum_{j=0}^{n} \beta_j \, \boldsymbol{\varphi}_j \in V_n} \|\mathbf{u} - \mathbf{v}_n\|.$$

Jedná se o řešení soustavy lineárních rovnic

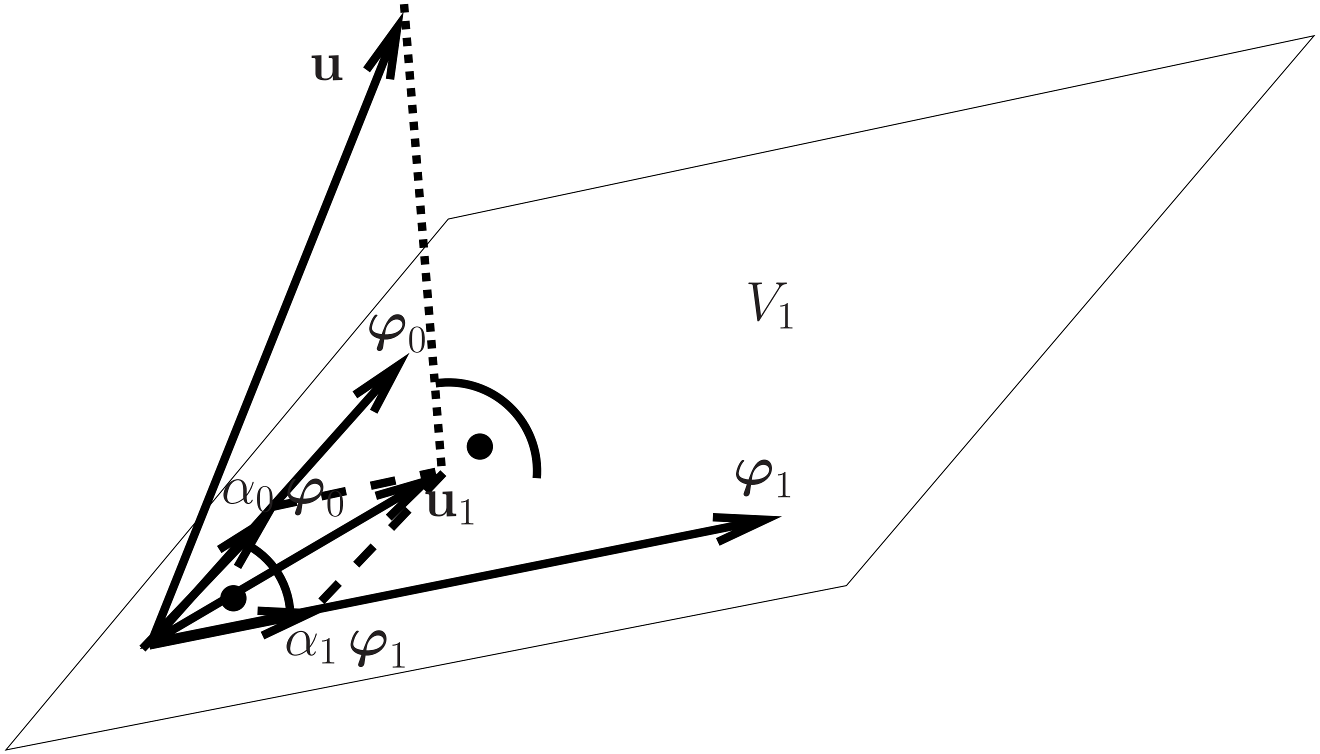
$$\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\alpha} = \mathbf{b},$$

kde

$$\mathbf{A} := \begin{pmatrix} (\boldsymbol{\varphi}_0, \boldsymbol{\varphi}_0) & \dots & (\boldsymbol{\varphi}_0, \boldsymbol{\varphi}_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ (\boldsymbol{\varphi}_n, \boldsymbol{\varphi}_0) & \dots & (\boldsymbol{\varphi}_n, \boldsymbol{\varphi}_n) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} := \begin{pmatrix} (\mathbf{u}, \boldsymbol{\varphi}_0) \\ \vdots \\ (\mathbf{u}, \boldsymbol{\varphi}_n) \end{pmatrix}.$$

Metoda nejmenších čtverců abstraktně

Ortogonální projekce dat do podprostoru



Polygonální regrese jako ortogonální projekce

$$\boldsymbol{\varphi}_j := x^j, \quad (f(x), g(x)) := \sum_{i=0}^{m} f(x_i)\, g(x_i).$$

Stabilní a rychlé numerické metody pro řešení náročných inženýrských úloh

Osnova 3. přednášky: Aproximace metodou nejmenších čtverců, FFT

- Metoda nejmenších čtverců konkrétně
- Metoda nejmenších čtverců abstraktně
- Metoda nejmenších čtverců stabilně a rychle
- Rychlá Fourierova transformace
- Spektrální metody řešení diferenciálních rovnic

Metoda nejmenších čtverců stabilně a rychle

Legendreova řada

Pro skalární součin

$$(f(x), g(x)) := \int_{-1}^{1} f(x)\, g(x)\, dx$$

volíme bázi Legendreových polynomů

$$P_0(x) := 1, \quad P_1(x) := x, \quad P_j(x) := \frac{2j-1}{j}\, x\, P_{j-1}(x) - \frac{j-1}{j}\, P_{j-2}(x) \text{ pro } j \geq 2.$$

Aproximace funkce $f(x)$ je pak částečný součet (Fourier-)Legendreovy řady

$$f_n(x) = \sum_{j=0}^{n} \frac{(f(x), P_j(x))}{(P_j(x), P_j(x))}\, P_j(x).$$

Skalární součiny aproximujeme Gauss-Legendreovou kvadraturou řádu $N > n$.

Metoda nejmenších čtverců stabilně a rychle

Čebyševova řada

Pro skalární součin

$$(f(x), g(x)) := \int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x)\, g(x)\, dx$$

volíme bázi Čebyševových polynomů

$$T_0(x) := 1, \quad T_1(x) := x, \quad T_j(x) := 2\,x\,T_{j-1}(x) - T_{j-2}(x) \text{ pro } j \geq 2.$$

Aproximace funkce $f(x)$ je pak částečný součet (Fourier-)Čebyševovy řady

$$f_n(x) = \sum_{j=0}^{n} \frac{(f(x), T_j(x))}{(T_j(x), T_j(x))}\, T_j(x).$$

Skalární součiny aproximujeme Gauss-Čebyševovou kvadraturou řádu $N > n$.

Metoda nejmenších čtverců stabilně a rychle

Laguerrova řada

Pro skalární součin

$$(f(x), g(x)) := \int_0^\infty \mathrm{e}^{-x} f(x)\, g(x)\, dx$$

volíme bázi Laguerrových polynomů

$$L_0(x) := 1, \quad L_1(x) := 1-x, \quad L_j(x) := \frac{2\,j-1-x}{n}\, L_{j-1}(x) - \frac{j-1}{j} L_{j-2}(x) \text{ pro } j \geq 2.$$

Aproximace funkce $f(x)$ je pak částečný součet (Fourier-)Laguerrovy řady

$$f_n(x) = \sum_{j=0}^{n} \frac{(f(x), L_j(x))}{(L_j(x), L_j(x))}\, L_j(x).$$

Skalární součiny aproximujeme Gauss-Laguerrovou kvadraturou řádu $N > n$.

Metoda nejmenších čtverců stabilně a rychle

Hermiteova řada

Pro skalární součin

$$(f(x), g(x)) := \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-x^2} f(x)\, g(x)\, dx$$

volíme bázi Hermiteových polynomů

$$H_0(x) := 1, \quad H_1(x) := x, \quad H_j(x) := 2\,x\,H_{j-1}(x) - 2\,(j-1)\,H_{j-2}(x) \text{ pro } j \geq 2.$$

Aproximace funkce $f(x)$ je pak částečný součet (Fourier-)Hermiteovy řady

$$f_n(x) = \sum_{j=0}^{n} \frac{(f(x), H_j(x))}{(H_j(x), H_j(x))} H_j(x).$$

Skalární součiny aproximujeme Gauss-Hermiteovou kvadraturou řádu $N > n$.

Stabilní a rychlé numerické metody
pro řešení náročných inženýrských úloh

Osnova 3. přednášky: Aproximace metodou nejmenších čtverců, FFT

- Metoda nejmenších čtverců konkrétně
- Metoda nejmenších čtverců abstraktně
- Metoda nejmenších čtverců stabilně a rychle
- Rychlá Fourierova transformace
- Spektrální metody řešení diferenciálních rovnic

Rychlá Fourierova transformace

Trigonometrická řada

Pro skalární součin

$$(f(x), g(x)) := \int_0^{2\pi} f(x)\, g(x)\, dx$$

volíme harmonickou, $L^2(0, 2\pi)$-ortogonální, bázi

$$\varphi_0^{\mathrm{c}}(x) := 1 \text{ a pro } j \geq 1 : \varphi_j^{\mathrm{c}}(x) := \cos(jx),\ \ \varphi_j^{\mathrm{s}}(x) := \sin(jx).$$

Aproximace funkce $f(x)$ je pak částečný součet trigonometrické řady

$$f_n(x) = \frac{2}{\pi} \int_0^{2\pi} f(x)\, dx + \frac{1}{\pi} \sum_{j=1}^{n} \left\{ \left(\int_0^{2\pi} f(z)\, \sin(jz)\, dz \right) \sin(jx) \right.$$
$$\left. + \left(\int_0^{2\pi} f(z)\, \cos(jz)\, dz \right) \cos(jx) \right\}.$$

Rychlá Fourierova transformace

Fourierova řada

Pro skalární součin nad komplexními funkcemi

$$(f(x), g(x)) := \int_0^{2\pi} f(x)\, g^*(x)\, dx,$$

kde $g^*(x) := \operatorname{Re} g(x) - \imath \operatorname{Im} g(x)$, volíme bázi

$$\varphi_j(x) := \mathrm{e}^{\imath(jx)} = \cos(jx) + \imath \sin(jx), \;\; j \geq 0.$$

Aproximace funkce $f(x)$ je pak částečný součet Fourierovy řady

$$f_n(x) = \frac{1}{2\pi} \sum_{j=0}^{n} \left(\int_0^{2\pi} f(z)\, \mathrm{e}^{-\imath(jz)}\, dz \right) \mathrm{e}^{\imath(jx)}$$

Rychlá Fourierova transformace

Diskrétní Fourierova transformace, složitost $O(n^2)$

$$\alpha_j := \sum_{k=0}^{n} f_k \,\mathrm{e}^{-2\pi\imath\left(j\frac{k}{n+1}\right)}, \quad k = 0, 1, \dots, n,$$

kde $f_k := f\left(2\pi\frac{k}{n+1}\right)$.

Rychlá Fourierova transformace (FFT), složitost $O(n \log n)$

Nechť $n = n_L$, $n_L + 1 = 2^L$, kde $L \in \mathbb{N}$. Pak

$$\underbrace{\alpha_j}_{\mathrm{FFT}_{L,j}(\mathbf{f})} = \sum_{k=0,2,\dots,n_L-1} f_k \exp\left(-2\pi\imath\left(j\frac{k}{n_L+1}\right)\right) + \sum_{k=1,3,\dots,n_L} f_k \exp\left(-2\pi\imath\left(j\frac{k}{n_L+1}\right)\right)$$

$$= \underbrace{\sum_{k=0}^{n_L-1} f_{2k} \exp\left(-2\pi\imath\left(j\frac{k}{n_{L-1}+1}\right)\right)}_{\mathrm{FFT}_{L-1,j}(\mathbf{f}_{\mathrm{sude}})} + \mathrm{e}^{-2\pi\imath\left(j\frac{1}{n_L+1}\right)} \underbrace{\sum_{k=0}^{n_L-1} f_{2k+1} \exp\left(-2\pi\imath\left(j\frac{k}{n_{L-1}+1}\right)\right)}_{\mathrm{FFT}_{L-1,j}(\mathbf{f}_{\mathrm{liche}})}$$

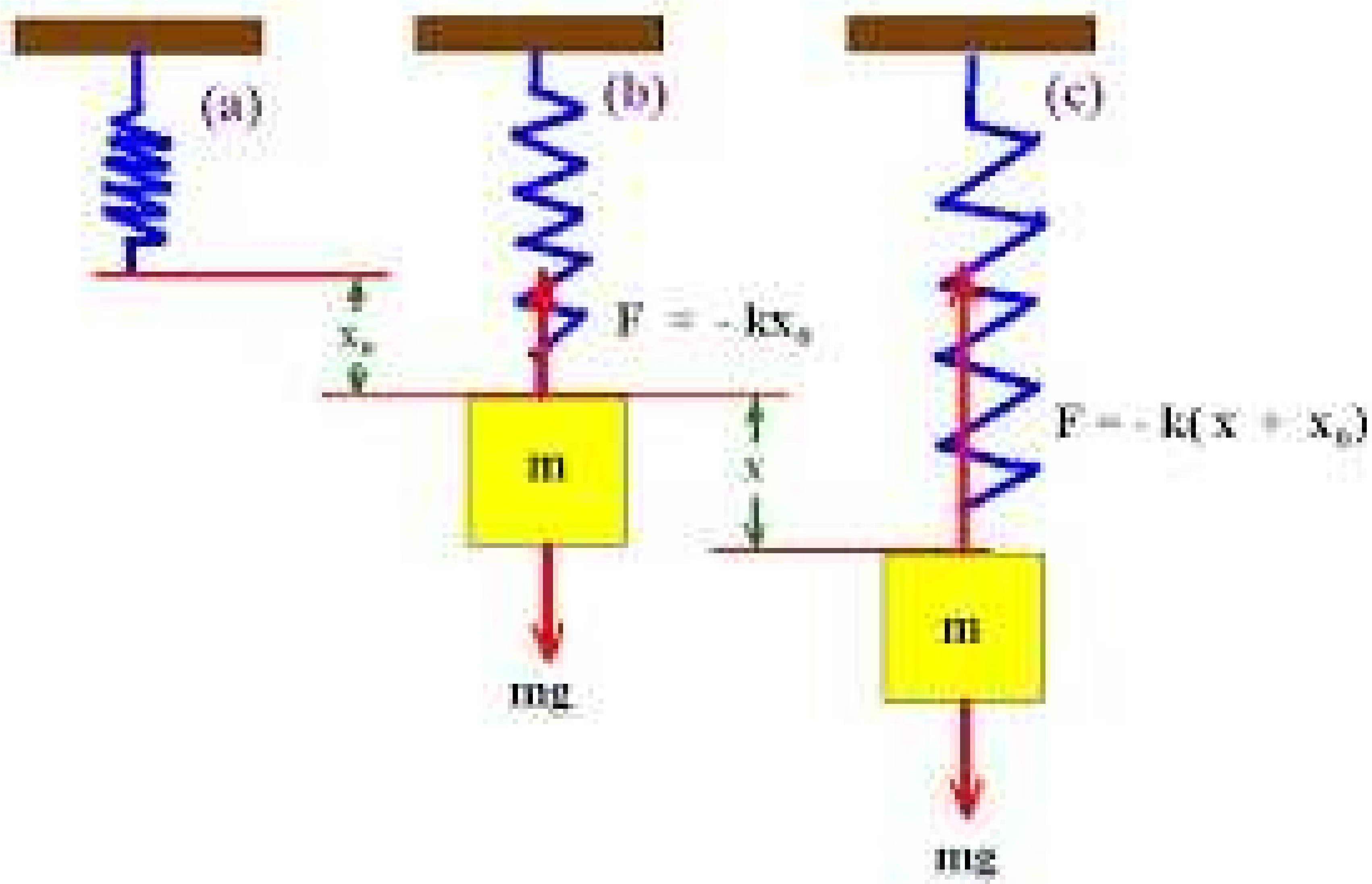
Stabilní a rychlé numerické metody pro řešení náročných inženýrských úloh

Osnova 3. přednášky: Aproximace metodou nejmenších čtverců, FFT

- Metoda nejmenších čtverců konkrétně
- Metoda nejmenších čtverců abstraktně
- Metoda nejmenších čtverců stabilně a rychle
- Rychlá Fourierova transformace
- Spektrální metody řešení diferenciálních rovnic

Spektrální metody řešení diferenciálních rovnic

Volné kmity na pružině



Spektrální metody řešení diferenciálních rovnic

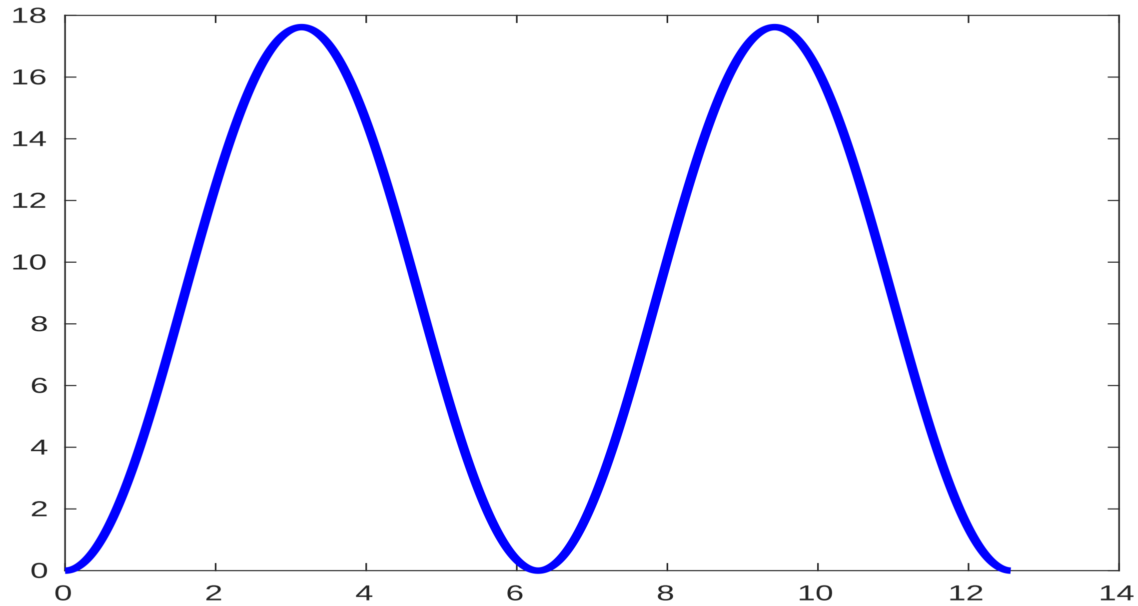
Volné kmity na pružině

Je dána počát. výchylka x_0, tíhové zrychlení g, hmotnost tělesa m a tuhost pružiny k.
Hledáme trajektorii $x(t)$:

$$\begin{cases} m\,x''(t) + k\,x(t) = m\,g - k\,x_0, \\ x(0) = 0, \\ x'(0) = 0. \end{cases}$$

Řešení je $x(t) = \left(x_0 - \frac{mg}{k}\right)\left(\cos\left(\sqrt{\frac{k}{m}}t\right) - 1\right)$.

Např. $x_0 = m = k = 1$:



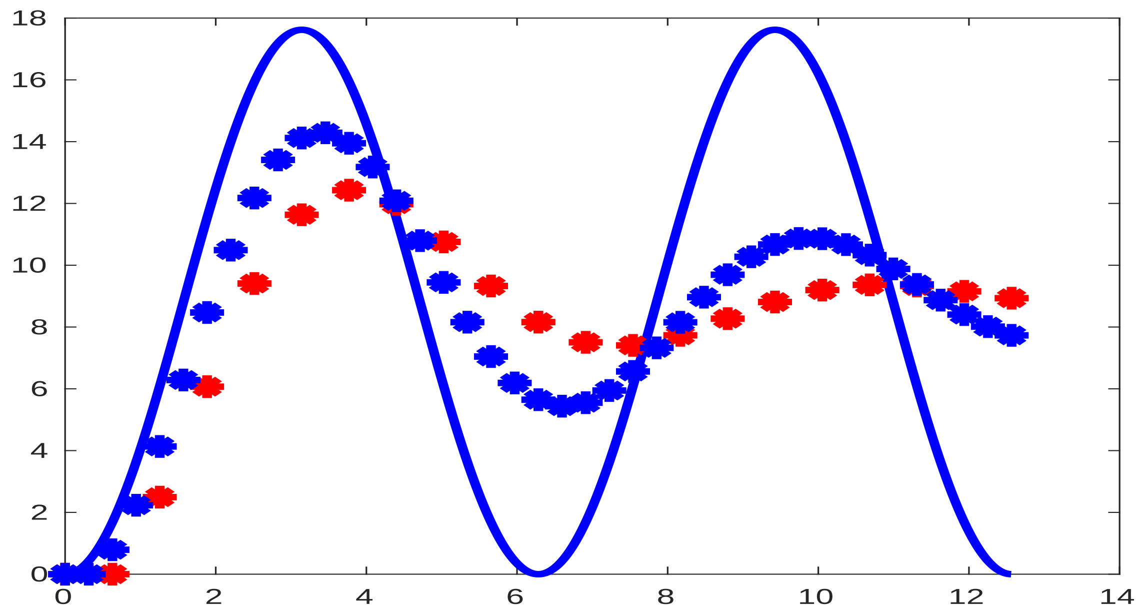
Spektrální metody řešení diferenciálních rovnic

Volné kmity na pružině: numerické řešení Eulerovou metodou

Je dána počát. výchylka x_0, tíhové zrychlení g, hmotnost tělesa m a tuhost pružiny k.
Navíc je dán časový krok Δt. Hledáme přibližné hodnoty $x_j \approx x(t_j)$ v časech $t_j = j\Delta t$:

$$\left\{ \begin{array}{rcl} m\,\frac{1}{(\Delta t)^2}(x_{j+2} - 2x_{j+1} + x_j) + k\,x_{j+2} & = & m\,g - k\,x_0, \\ x_0 & = & 0, \\ \frac{1}{\Delta t}(x_1 - x_0) & = & 0. \end{array} \right.$$

Např. $\Delta t = \frac{4\pi}{20}, \frac{4\pi}{40}$:



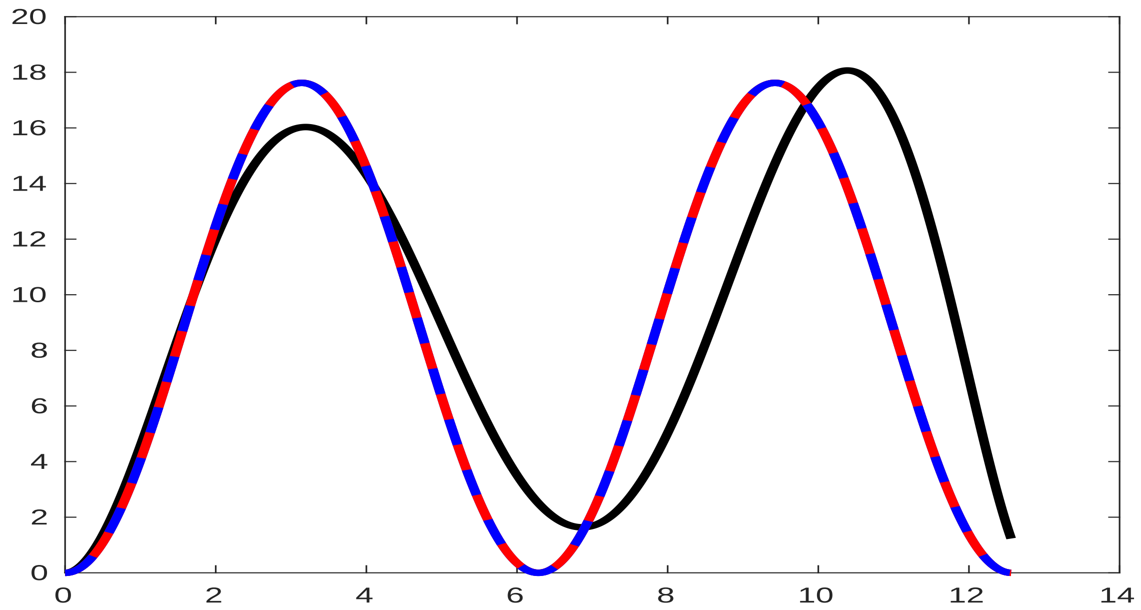
Spektrální metody řešení diferenciálních rovnic

Volné kmity na pružině: numerické řešení projekcí na polynomy

Je dána počát. výchylka x_0, tíhové zrychlení g, hmotnost tělesa m a tuhost pružiny k.
Navíc je dán stupeň polynomu $n+2$. Hledáme přibližné řešení
$x_n(t) = \sum_{j=2}^{n+2} \alpha_j t^j \approx x(t) \rightsquigarrow$ Soustava $n+1$ lineárních rovnic o $n+1$ neznámých:

$$t^i \cdot (m x_n''(t) + k x_n(t)) = -t^i \cdot (mg - kx_0) \text{ for } i = 0, 1, \ldots, n-2$$

Např. $n = 5, 10$:

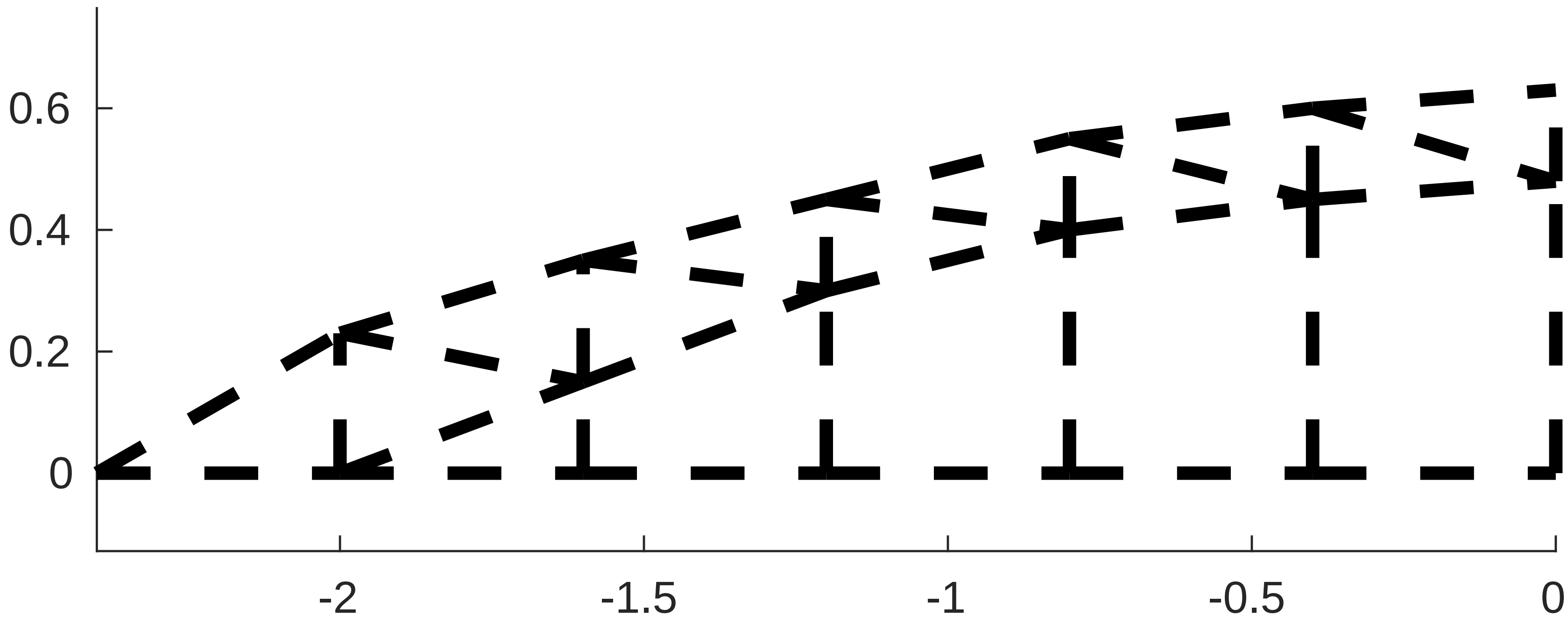


Spektrální metody řešení diferenciálních rovnic

Volné kmity Sýkorova mostu

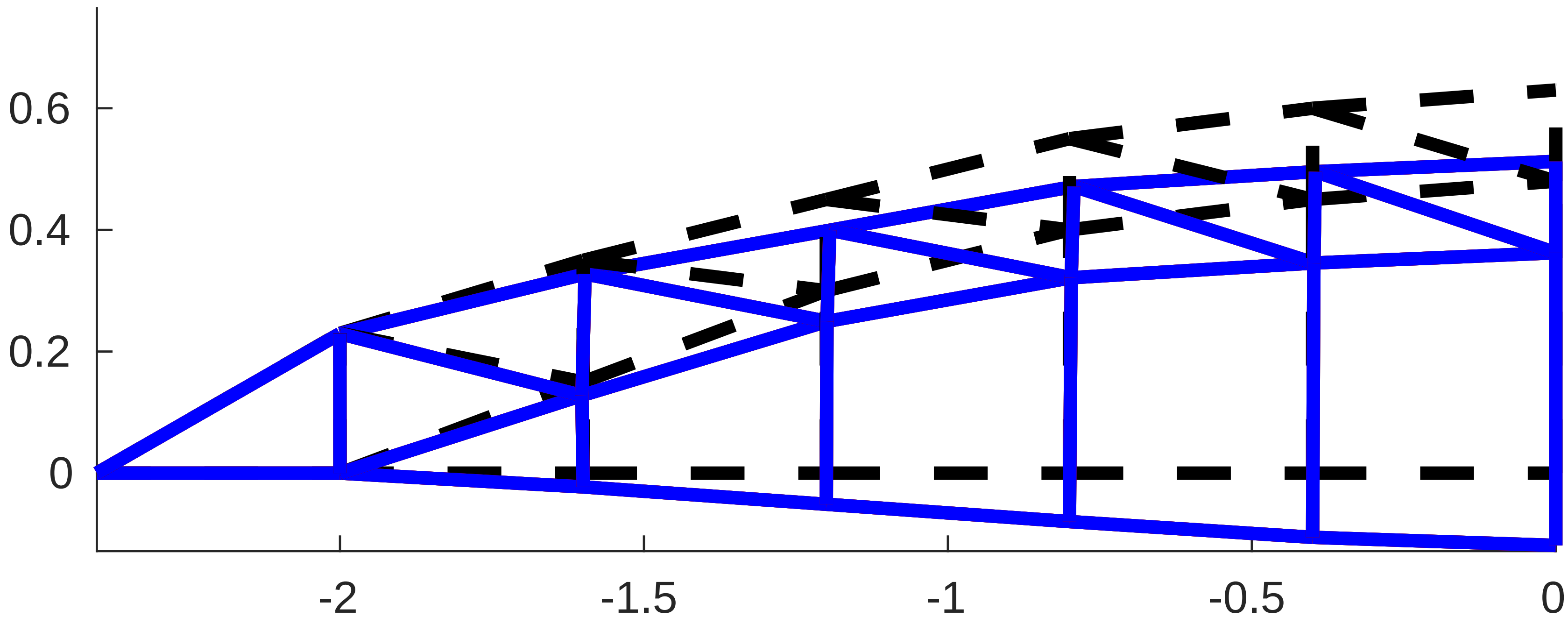
Spektrální metody řešení diferenciálních rovnic

Volné kmity Sýkorova mostu: Euler vers. projekce



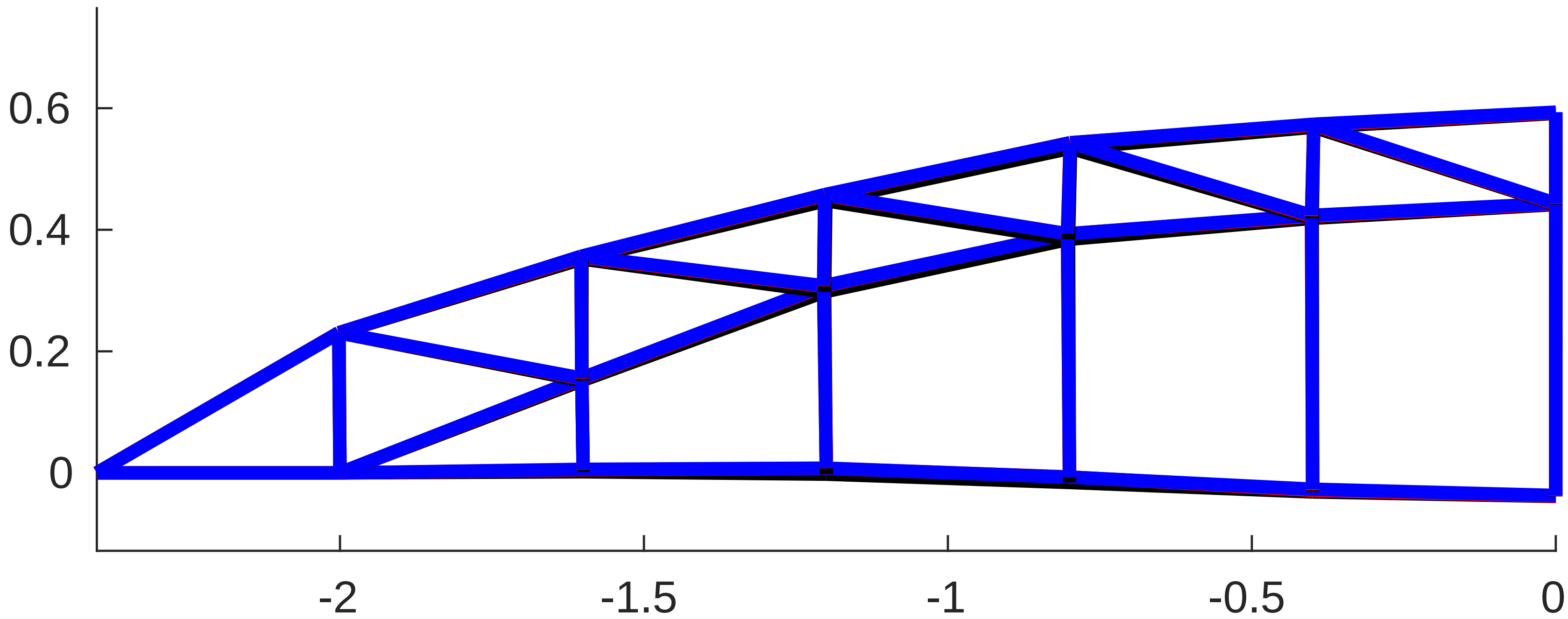
Spektrální metody řešení diferenciálních rovnic

Volné kmity Sýkorova mostu: Euler vers. projekce



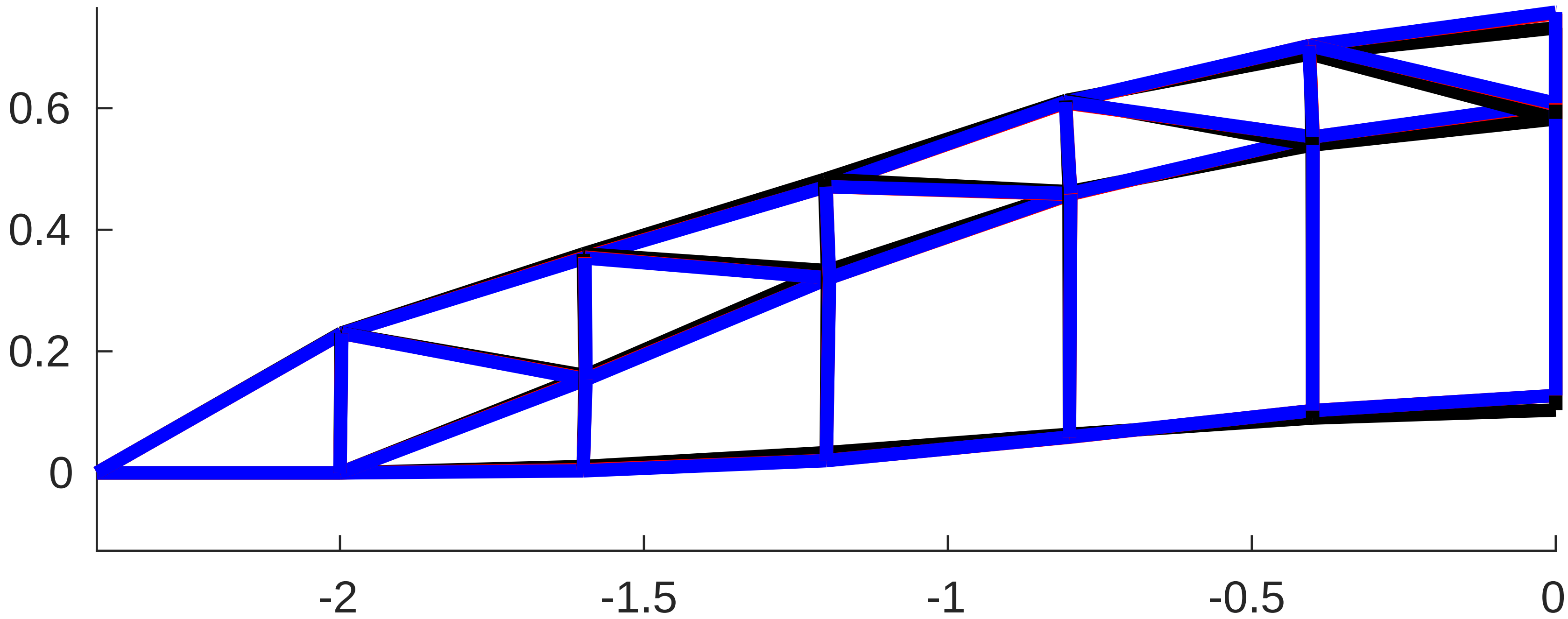
Spektrální metody řešení diferenciálních rovnic

Volné kmity Sýkorova mostu: Euler vers. projekce



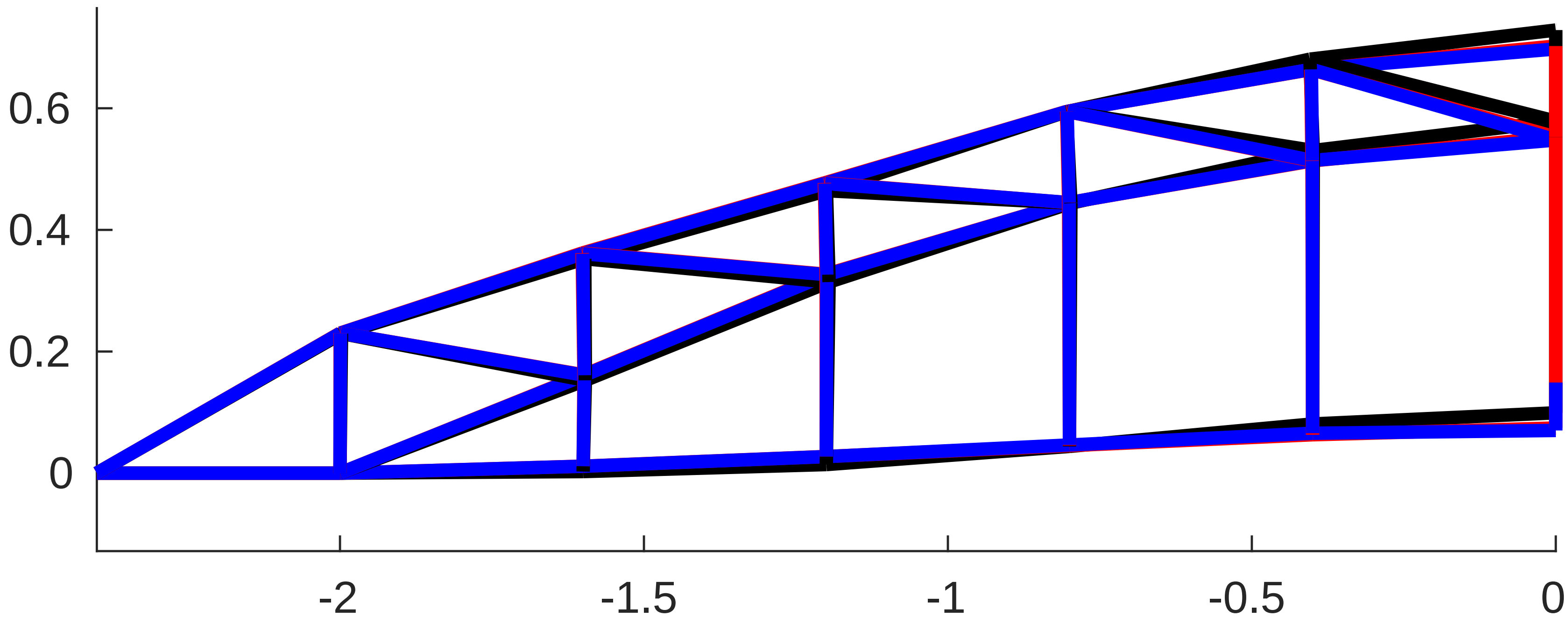
Spektrální metody řešení diferenciálních rovnic

Volné kmity Sýkorova mostu: Euler vers. projekce



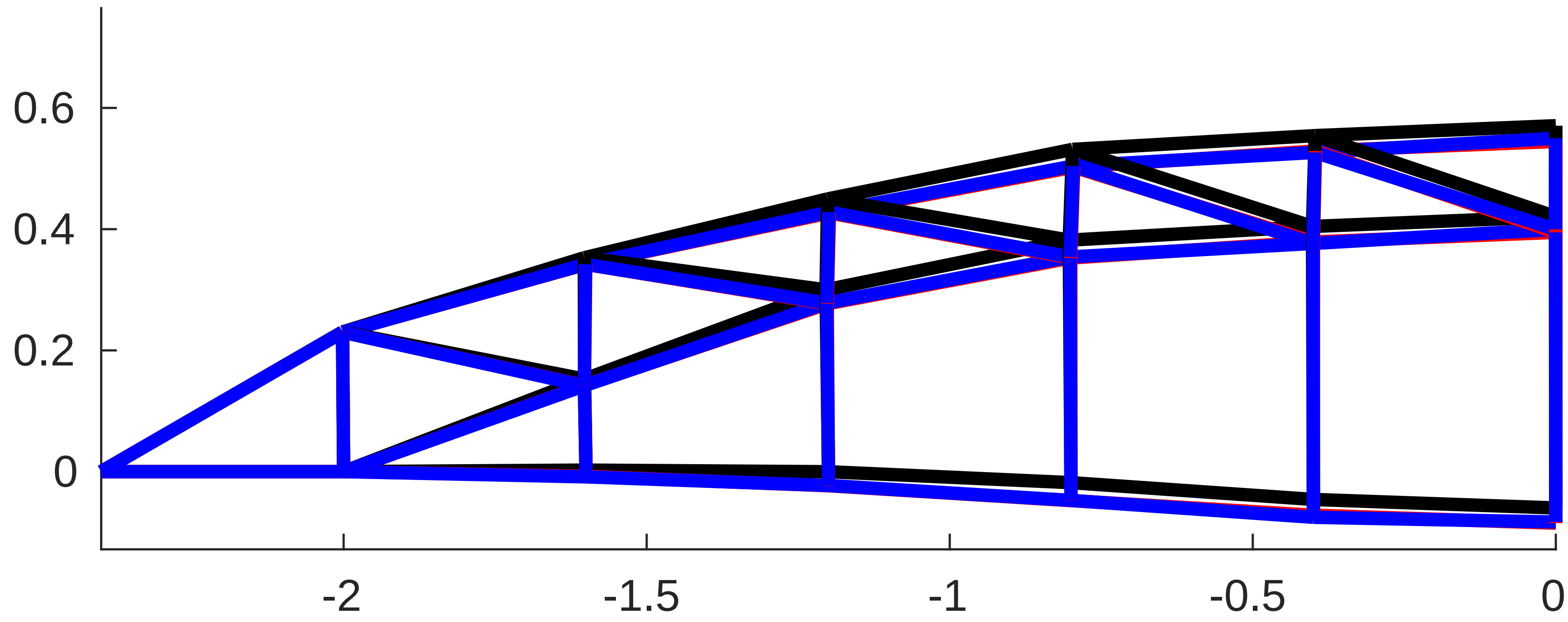
Spektrální metody řešení diferenciálních rovnic

Volné kmity Sýkorova mostu: Euler vers. projekce



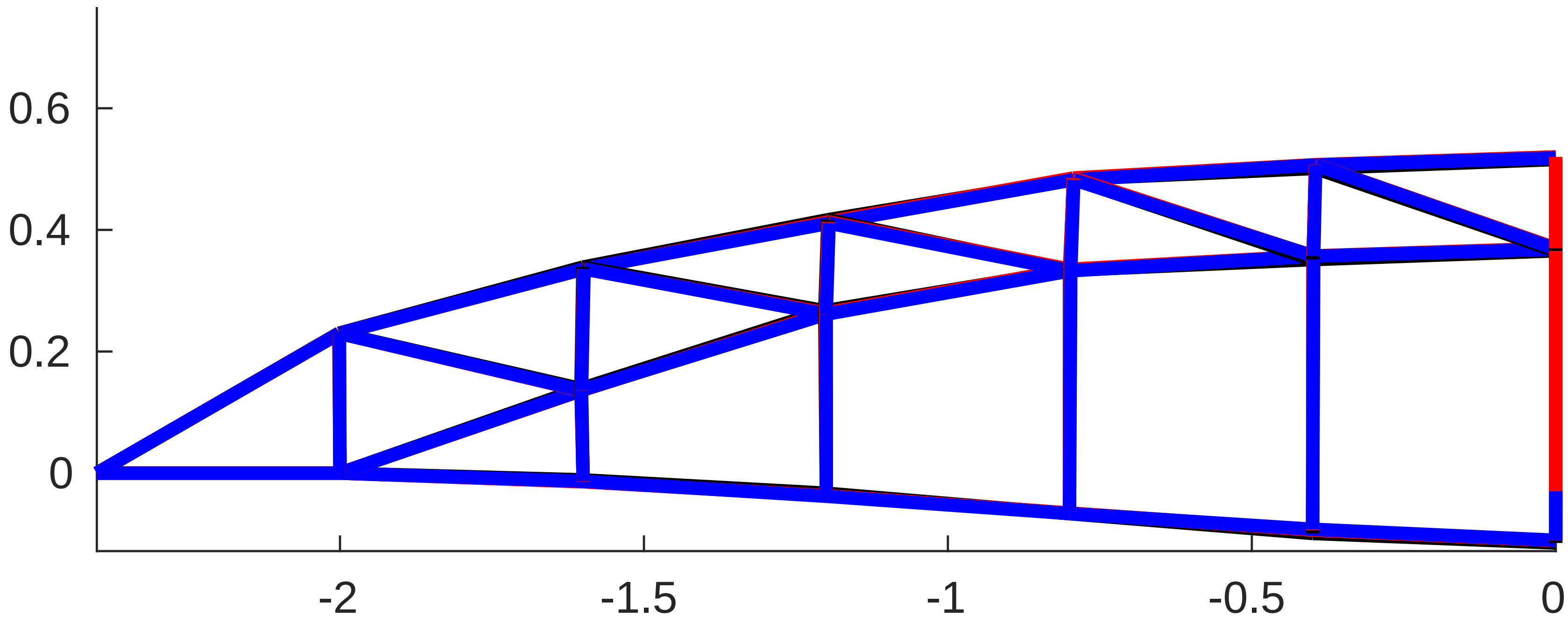
Spektrální metody řešení diferenciálních rovnic

Volné kmity Sýkorova mostu: Euler vers. projekce



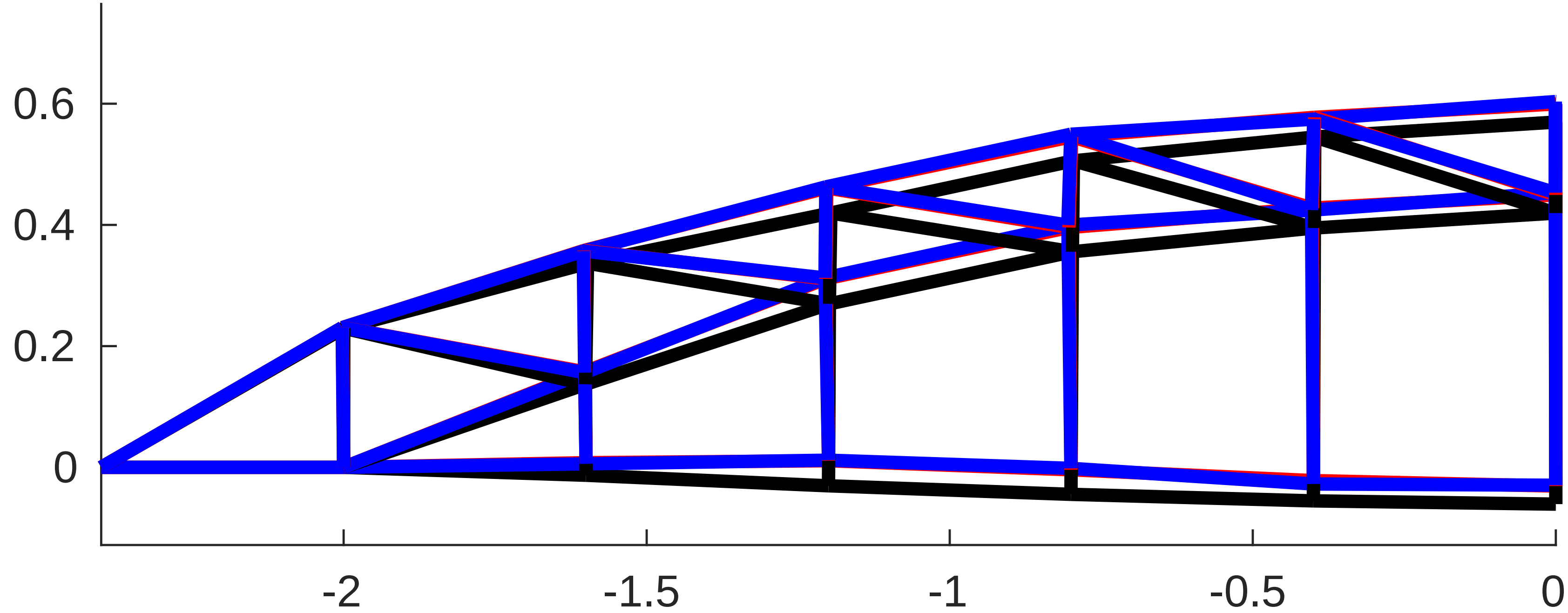
Spektrální metody řešení diferenciálních rovnic

Volné kmity Sýkorova mostu: Euler vers. projekce



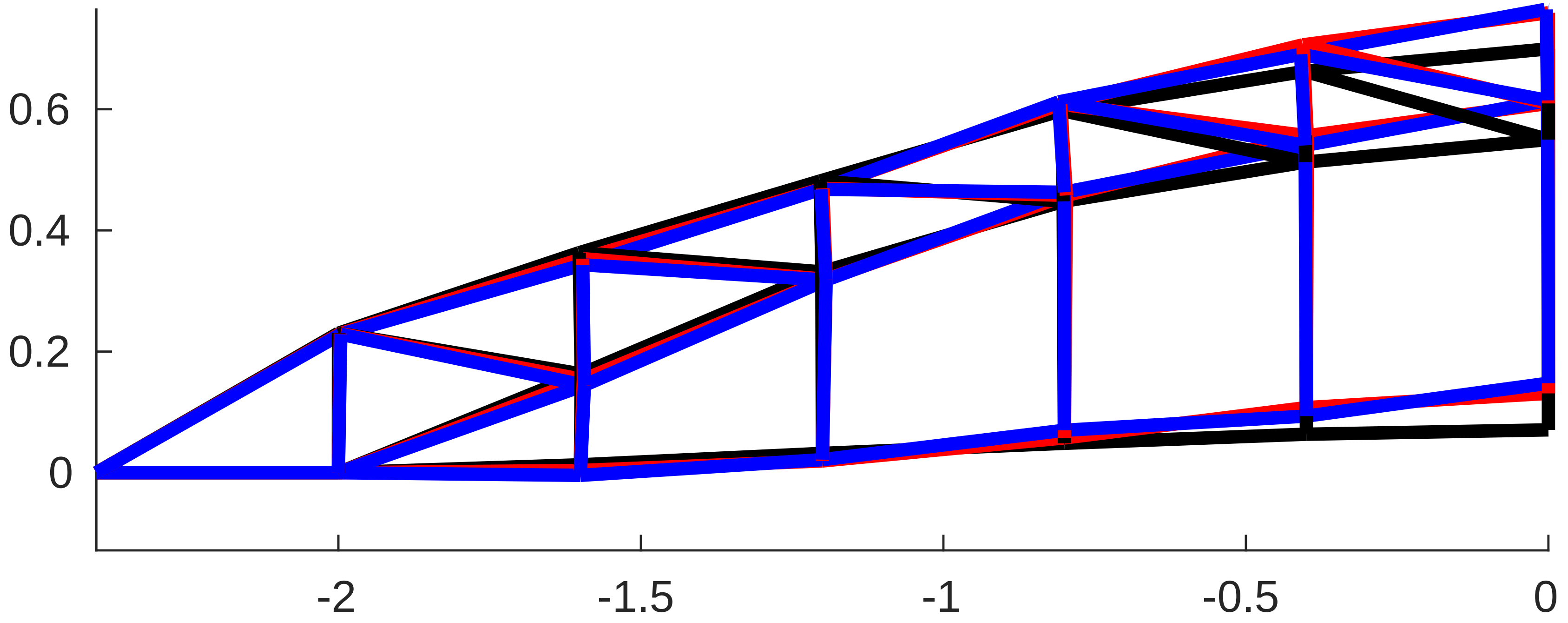
Spektrální metody řešení diferenciálních rovnic

Volné kmity Sýkorova mostu: Euler vers. projekce



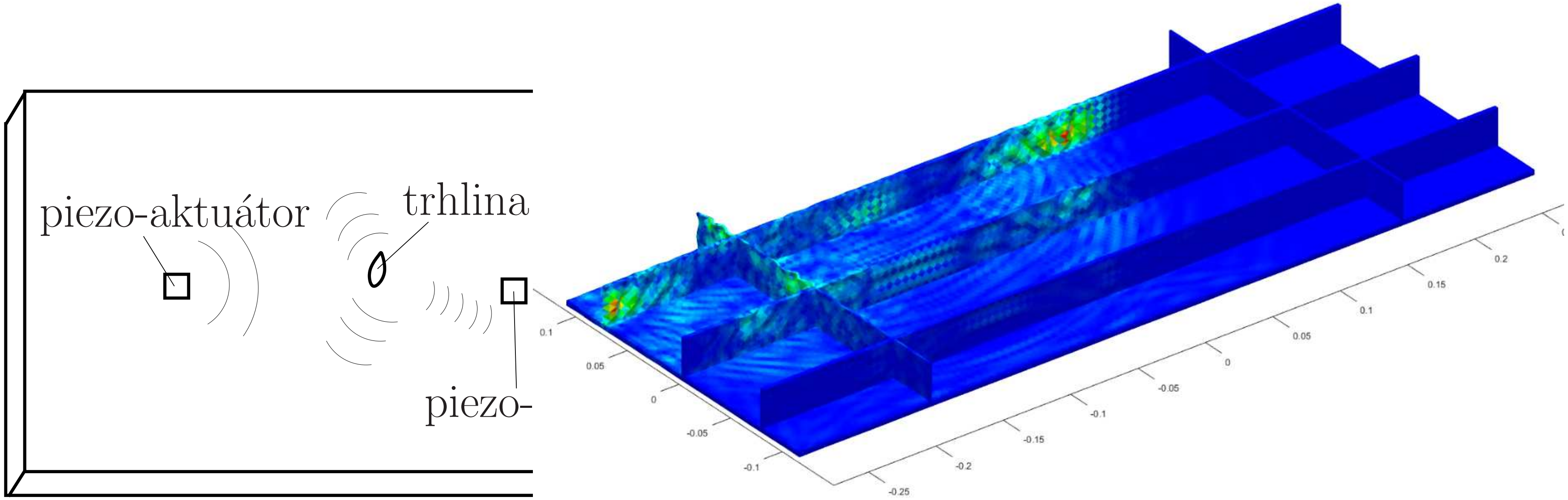
Spektrální metody řešení diferenciálních rovnic

Volné kmity Sýkorova mostu: Euler vers. projekce



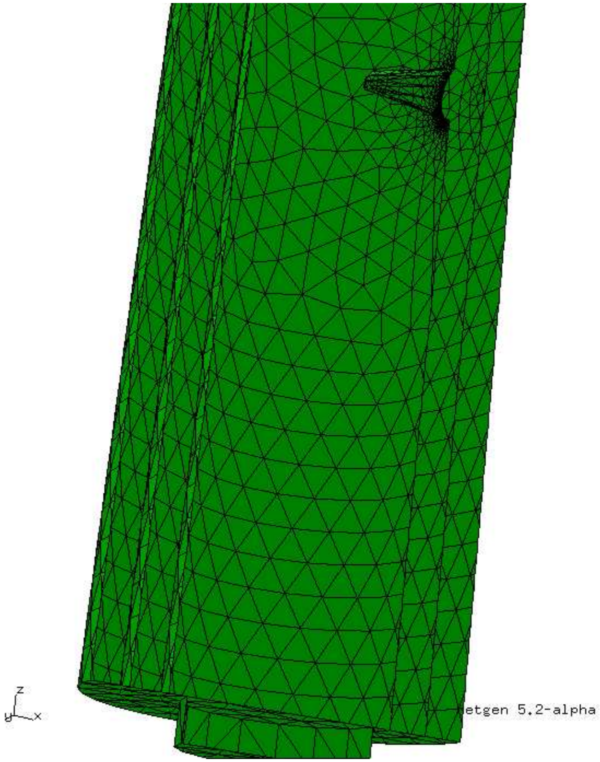
Spektrální metody řešení diferenciálních rovnic

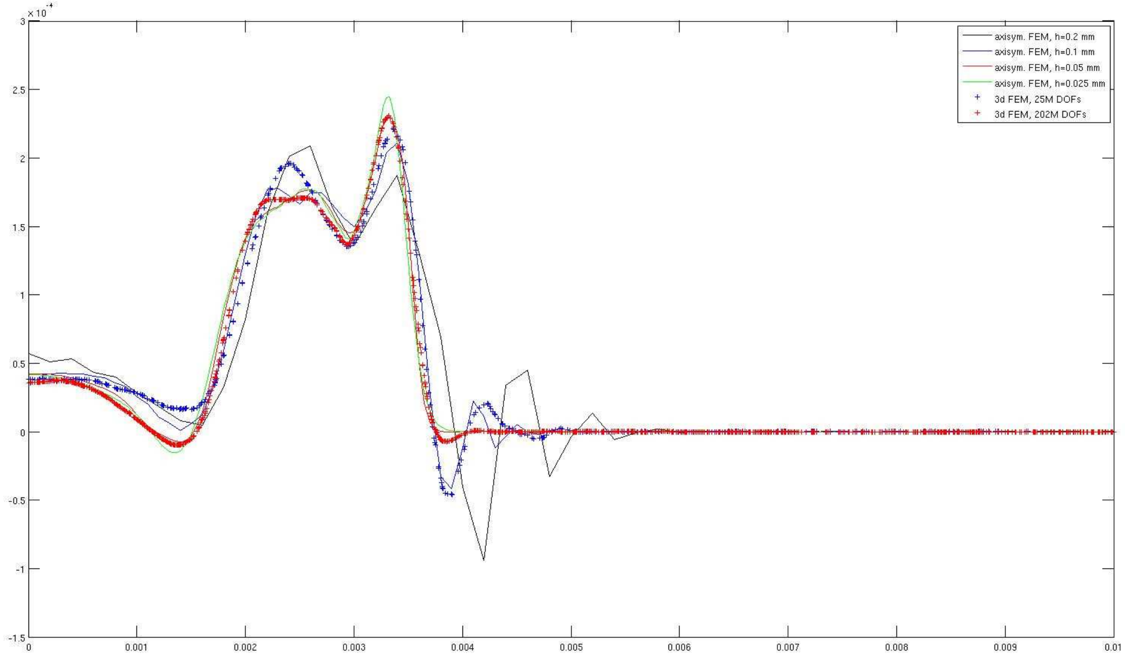
Ultrazvuková defektoskopie draku letadlaSpolupráce (s Honeywell)



Spektrální metody řešení diferenciálních rovnic

Ultrazvukové měření výšky hladiny oleje v autě (s Continental)





Spektrální metody řešení diferenciálních rovnic

Elektromagnetické tváření plechů (s Fraunhofer)

cívka (v Ω^{ext}): 3 závity,
budicí proud: amplituda 100 kA, půl peridoda sinu, frekvence 8.33 kHz,
vodič (Ω^{int}): hliníkový plech, tl. 2 mm thin, 2 mm nad cívkou