



ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská



Numerické řešení adjungované rovnice pro metodu fázového pole

Numerical solution of the adjoint equation for the phase-field model

Bakalářská práce

Autor: **Michal Bohatý**
Vedoucí práce: **doc. Ing. Tomáš Oberhuber, Ph.D.**
Konzultant: **Ing. Aleš Wodecki**
Akademický rok: 2022/2023

ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

Student: Michal Bohatý
Studijní program: Aplikace přírodních věd
Studijní obor: Matematické inženýrství
Studijní zaměření: Aplikované matematicko-stochastické metody
Název práce (česky): Numerické řešení adjungované rovnice pro metodu fázového pole
Název práce (anglicky): Numerical solution of the adjoint equation for the phase-field model

Pokyny pro vypracování:

- 1) Prostudujte základy metody fázového pole pro modelování fázových přechodů.
- 2) Nastudujte metodu konečných diferencí a implementujte řešič pro úlohu fázového pole.
- 3) Seznamte s adjungovanými rovnicemi pro řešení optimalizačních úloh s parciálními diferenciálními rovnicemi.
- 4) Implementujte řešič adjungované rovnice pro úlohu fázového pole a využijte ji k řízení procesu růstu krystalů.
- 5) Proveďte výpočetní studii.

Doporučená literatura:

- 1) M. Hinze, R. Pinnau, M. Ulbrich, S. Ulbrich, Optimization with PDE Constraints. Mathematical Modelling: Theory and Applications 23, Springer, 2008.
- 2) S. B. Biner, Programming Phase-Field Modeling. Springer, 2017.
- 3) L.S. Pontryagin, Mathematical Theory of Optimal Processes. Classics of Soviet Mathematics Book 1, Routledge, 2018.

Jméno a pracoviště vedoucího bakalářské práce:

Ing. Tomáš Oberhuber, Ph.D.

Katedra matematiky, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, České vysoké učení technické v Praze, Trojanova 13, 120 00 Praha 2

Jméno a pracoviště konzultanta:

Ing. Aleš Wodecki


Katedra matematiky, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, České vysoké učení technické v Praze, Trojanova 13, 120 00 Praha 2

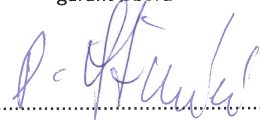
Datum zadání bakalářské práce: 31.10.2021

Datum odevzdání bakalářské práce: 7.7.2022

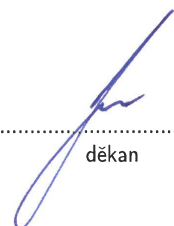
Doba platnosti zadání je dva roky od data zadání.

V Praze dne 21. října 2021


.....
garant oboru


.....
vedoucí katedry




.....
děkan

Poděkování:

Chtěl bych poděkovat svému školiteli doc. Ing. Tomášovi Oberhuberovi Ph.D. za ochotu, poskytnuté rady a pozitivní přístup při vedení mé bakalářské práce. Dále děkuji svému konzultantovi Ing. Alešovi Wodecki, zejména za rychlokurz z funkcionální analýzy.

Čestné prohlášení:

Prohlašuji, že jsem tuto práci vypracoval samostatně a uvedl jsem všechnu použitou literaturu.

V Praze dne 4. ledna 2023

Michal Bohatý

Název práce:

Numerické řešení adjungované rovnice pro metodu fázového pole

Autor: Michal Bohatý

Obor: Matematické inženýrství

Zaměření: Aplikované matematicko-stochastické metody

Druh práce: Bakalářská práce

Vedoucí práce: doc. Ing. Tomáš Oberhuber, Ph.D. Katedra matematiky, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, České vysoké učení technické v Praze, Trojanova 13, 120 00 Praha 2

Konzultant: Ing. Aleš Wodecki Katedra matematiky, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, České vysoké učení technické v Praze, Trojanova 13, 120 00 Praha 2

Abstrakt: Tato práce se zabývá optimalizační úlohou řízení růstu krystalů pomocí regulace teploty na okrajích oblasti, ve které ke krystalizaci dochází. Pro efektivní řešení této úlohy používáme metodu založenou na vyřešení adjungované rovnice. Fázové přechody popisujeme pomocí modelu fázového pole, tvořeného parciálními diferenciálními rovnicemi. Tyto rovnice v průběhu optimalizace řešíme numericky metodou konečných diferencí. Program řešící úlohu je implementovaný v jazyce C++. Výsledkem této práce pak je výpočetní studie, ve které se pomocí řešení konkrétních úloh snažíme zjistit vlastnosti metody s řešením adjungované rovnice i úlohy řízení krystalizace pomocí okrajových podmínek jako takové.

Klíčová slova: adjungovaná rovnice, krystalizace, metoda konečných diferencí, model fázového pole, optimalizace

Title:

Numerical solution of the adjoint equation for the phase-field model

Author: Michal Bohatý

Abstract: This work is concerned with the optimization problem of controlling crystal growth by manipulating temperature at the edges of the region in which crystallization occurs. To solve this problem efficiently, we use a method based on solving the adjoint equation. To describe phase transitions, we use the phase-field model consisting of partial differential equations. During the optimization process, we solve these equations numerically using the finite difference method. The program that solves the whole problem is implemented in C++. As a result of this work, we then present a computational study in which, by solving specific problems, we try to investigate properties of the method with solving the adjoint equation and also properties of the problem of controlling crystallization using boundary conditions as such.

Key words: adjoint equation, crystallization, finite difference method, optimization, phase-field model

Obsah

Úvod	7
1 Matematický model a aparát	8
1.1 Popis úlohy	8
1.2 Model fázového pole	8
1.3 Variační počet na Banachových prostorech	9
2 Metoda adjungované rovnice	12
2.1 Obecná formulace	12
2.2 Adjungovaná rovnice pro model fázového pole	13
2.2.1 Parametrický přístup	14
2.2.2 Variační přístup	18
3 Numerické řešení úlohy	23
3.1 Diskretizace	23
3.2 Implementace	27
4 Výpočetní studie	29
4.1 Nastavení parametrů	29
4.2 Test konvergence	30
4.3 Citlivost na počáteční odhad řešení	31
4.4 Řešení konkrétních úloh	32
4.4.1 Rozdělení krystalu	32
4.4.2 Posunutí krystalu	35
4.4.3 Obdélník	36
4.4.4 Konkávní tvar	37
4.4.5 Lineární reakční člen	39
Závěr	41

Úvod

Tato práce se zabývá možností řídit proces krystalizace pouze pomocí regulace teploty na krajích oblasti, ve které ke krystalizaci dochází. Tato úloha by mohla být zajímavá i z praktického hlediska, například krystalizace kovů hraje dnes v průmyslu důležitou roli. K popisu fázových přechodů budeme používat model fázového pole [5, 6]. Při jeho použití vede zmíněný problém z matematického hlediska na optimalizační úlohu s vazbou danou parciálními diferenciálními rovnicemi. Naším cílem je řešení dvourozměrného případu této úlohy za použití metody s řešením adjungované rovnice [2]. Optimalizaci budeme provádět numericky pomocí gradientního sestupu. Výpočet implementujeme v jazyce C++.

V první kapitole si zavedeme model fázového pole a matematickou teorii potřebnou k dalšímu postupu. Také si zde ještě přesněji definujeme úlohu, kterou budeme řešit. Druhá část je věnována metodě adjungované rovnice, která umožňuje efektivně získat gradient účelové funkce při optimalizaci. Nejprve je představena její obecná formulace a následně je odvozena i konkrétně pro náš případ. Její odvození je provedeno dvakrát, jednou za použití obecné teorie, podruhé pomocí jednoduššího přístupu, ve kterém si vystačíme s použitím méně pokročilé matematiky. Tyto výsledky pak použijeme při numerickém řešení úlohy, kterému se věnuje třetí kapitola. V té si představíme nejprve způsob diskretizace problému a následně samotnou implementaci a algoritmický postup výpočtu. Poslední částí je pak výpočetní studie, ve které se budeme věnovat hlavně vizualizaci řešení pro konkrétní úlohy. Ty se pokusíme volit tak, abychom se pomocí nich dozvěděli něco o vlastnostech jak metody adjungované rovnice, tak i samotné úlohy řízení krystalizace pomocí okrajových podmínek.

Kapitola 1

Matematický model a aparát

1.1 Popis úlohy

Jak již bylo naznačeno v úvodu, zabýváme se úlohou, kdy máme dvourozměrnou oblast s kapalinou a pomocí řízení teploty na krajích této oblasti chceme dosáhnout vytvoření krystalu předepsaného tvaru. Úlohu budeme řešit v časovém intervalu $[0, T]$, bude nás tedy zajímat tvar krystalu v čase T . Tento tvar sice nejspíše nebude stabilní, tím co by se s ním dělo dále v čase se ale nebudeme v této práci zabývat.

1.2 Model fázového pole

Problematiku přechodu mezi kapalinou a pevnou látkou lze popsat více způsoby. Jedním z nich je Van der Waalsův přístup, který je založený na myšlence spojitého přechodu mezi fázemi, k němuž dochází na tenkém rozhraní. Jeho výhodou je, že dokáže popsat stav podchlazené kapaliny. Z tohoto přístupu pak vychází model fázového pole, který je popsán pomocí soustavy dvou parciálních diferenciálních rovnic (PDR). První z nich je rovnice vedení tepla, popisující změny teploty ve zkoumané oblasti, druhá je Allenova-Cahnova rovnice pro fázové pole, která popisuje vývoj obou fází v čase. Zde uvedeme pouze výsledný tvar modelu, odvození a podrobnější informace lze najít například v [5, 6, 7].

Uvažujme omezenou oblast $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ a časový interval $[0, T]$. Dále zavedme funkci teploty $u : \Omega \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ a fázovou funkci $y : \Omega \times [0, T] \rightarrow [0, 1]$, která udává v jaké fázi se látka v příslušném místě nachází. Hodnoty blízké nule odpovídají kapalnému stavu, pevné fázi odpovídají hodnoty blízké jedničce. Za rozhraní mezi fázemi se považuje vrstevnice $y = \frac{1}{2}$. Rovnice pro vývoj fázového pole má pak tvar

$$\alpha \xi^2 y_t = \xi^2 \Delta y + f(u, y, \xi) \quad \text{na } \Omega \times (0, T), \quad (1.1)$$

kde ξ je parametr udávající tloušťku rozhraní a α je další parametr modelu. V celé práci je používáno značení $y_t := \frac{\partial y}{\partial t}$. Konkrétní podoba reakčního členu $f(u, y, \xi)$ závisí na použitém modelu. Nejjednodušší možností je (v teplotě) lineární člen

$$f(u, y, \xi) = ay(1 - y) \left(y - \frac{1}{2} \right) - b\beta\xi(u - u_{\text{mt}}), \quad (1.2)$$

kde a, b, β jsou konstanty a u_{mt} je teplota tání. Tento člen má ale fyzikální význam pouze pro malá podchlazení, což se při numerické simulaci ukázalo jako problém. Proto se dále budeme zabývat

modelem $\Sigma P1-P$, navrženém v [7], který umožňuje realizovat i velké hodnoty podchlazení při zachování fyzikálního významu. Funkce f v něm má tvar

$$f(u, y; \xi) = 2y(1-y) \left(y - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \beta b \xi \Sigma(y) (u - u_{\text{mt}}) \right), \quad (1.3)$$

kde

$$\Sigma(y; \varepsilon_0, \varepsilon_1) = \begin{cases} 0, & y \leq \varepsilon_0 \\ 1, & y \geq \varepsilon_1 \\ \frac{3(y-\varepsilon_0)^2}{(\varepsilon_1-\varepsilon_0)^2} - \frac{2(y-\varepsilon_0)^3}{(\varepsilon_1-\varepsilon_0)^3}, & y \in (\varepsilon_0, \varepsilon_1), \end{cases} \quad (1.4)$$

a

$$b = \frac{1}{6} \left(\frac{\varepsilon_0^3}{15} + \frac{\varepsilon_0^2 \varepsilon_1}{10} - \frac{3\varepsilon_0^2}{20} - \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_1}{5} + \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_1^2}{10} - \frac{3\varepsilon_1^2}{20} + \frac{\varepsilon_1^3}{15} + \frac{1}{6} \right)^{-1}, \quad (1.5)$$

β je koeficient podchlazení a $\varepsilon_0, \varepsilon_1$ jsou další parametry.

Při předpokladu dostatečné diferencovatelnosti funkcí u a y můžeme zapsat soustavu rovnic popisujících model, jako

$$u_t = \Delta u + Ly_t \quad \text{na } \Omega \times (0, T), \quad (1.6)$$

$$\alpha \xi^2 y_t = \xi^2 \Delta y + f(u, y, \xi) \quad \text{na } \Omega \times (0, T), \quad (1.7)$$

$$f(u, y; \xi) = 2y(1-y) \left(y - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} b \beta \xi \Sigma(y) (u - u_{\text{mt}}) \right),$$

$$u|_{t=0} = u_0 \quad \text{na } \Omega, \quad (1.8)$$

$$y|_{t=0} = y_0 \quad \text{na } \Omega, \quad (1.9)$$

s Dirichletovými okrajovými podmínkami

$$u|_{\partial\Omega} = s \quad \text{na } \partial\Omega \times [0, T], \quad (1.10)$$

$$y|_{\partial\Omega} = g \quad \text{na } \partial\Omega \times [0, T]. \quad (1.11)$$

Okrajová podmínka pro fázové pole pro nás není příliš důležitá, volíme tedy nejjednodušší možnost $g \equiv 0$. Tato volba zároveň zabraňuje nežádoucímu růstu krystalu od kraje oblasti.

Nášim cílem pak bude pro tento model nalézt takové okrajové podmínky s , aby $y|_{t=T} = y_f$ na Ω , kde y_f je předem zvolený cílový profil.

1.3 Variační počet na Banachových prostorech

K obecnému odvození adjungované rovnice budeme potřebovat některé pojmy a věty z funkcionální analýzy. Věty zde budou uvedeny bez důkazů, podrobnosti lze nalézt například v [1, 2, 10]. Pokud v následujících větách a definicích nebude řečeno jinak, X, Y, Z budou označovat Banachovy prostory.

Nejprve si zavedeme pojem omezeného lineárního operátoru.

Definice 1. Necht X, Y jsou normované vektorové prostory a $T : X \rightarrow Y$ je lineární operátor. Pak řekneme, že T je omezený $\Leftrightarrow (\exists M > 0)(\forall x \in X)(\|T(x)\|_Y \leq M\|x\|_X)$. Omezenost je také ekvivalentní se spojitostí T .

Dále si rozšíříme pojem diferencovatelnosti na operátory mezi Banachovými prostory, což budeme potřebovat pro výpočet gradientu naší účelové funkce při optimalizaci.

Definice 2. Buď $U \subset X$ otevřená a neprázdná, $f : U \rightarrow Y$, $x \in U$, $v \in X$.

(i) Potom

$$\delta f(x; v) := \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(x + tv) - f(x)}{t}$$

nazveme derivací f v bodě x a ve směru v .

(ii) Pokud existuje omezený lineární operátor $f'(x)$ takový, že

$$f'(x)[h] = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(x + th) - f(x)}{t} \quad \forall h \in X,$$

nazýváme ho Gâteauxova derivace f (G-derivace).

(iii) Pokud Gâteauxova derivace navíc splňuje podmínku

$$\lim_{\|h\|_X \rightarrow 0} \frac{\|f(x + h) - f(x) - f'(x)[h]\|_Y}{\|h\|_X} = 0,$$

říkáme jí Fréchetova derivace f (F-derivace).

Definice 3. Nechť $f : X \times Y \rightarrow Z$ má F-derivaci v bodě $(a, b) \in X \times Y$, označme $f_1(x) = f(x, b)$ a $f_2(y) = f(a, y)$. Potom

$$f_x(a, b)[v] := f'_1(a)[v], \quad v \in X,$$

respektive

$$f_y(a, b)[w] := f'_2(b)[w], \quad w \in Y$$

nazýváme parciální Fréchetovy derivace.

Poznámka 1. Přímo dosazením do podmínky z definice F-derivace je vidět, že pro omezený lineární operátor $f : X \rightarrow Y$ je

$$f'(x) = f, \quad \forall x \in X,$$

což se nám bude hodit při derivaci skalárního součinu.

Pro provedení derivace budeme potřebovat některé věty pro počítání s derivacemi a větu o implicitní funkci.

Věta 1. Nechť $f : X \times Y \rightarrow Z$ má F-derivaci v bodě $(a, b) \in X \times Y$. Pak

$$f'(a, b)[v, w] = f_x(a, b)[v] + f_y(a, b)[w].$$

Věta 2 (Řetězové pravidlo). Nechť $f : Y \rightarrow Z$, $g : X \rightarrow Y$ jsou F-diferencovatelné v $x \in X$, respektive $g(x) \in Y$ a $h(x) = f(g(x))$. Potom $h : X \rightarrow Z$ je F-diferencovatelná v x a

$$h'(x)[v] = f'(g(x))[g'(x)[v]], \quad v \in X.$$

Věta 3 (O implicitní funkci). Nechť $f : X \times Y \rightarrow Z$ je spojitě F-diferencovatelná, existuje $(a, b) \in X \times Y$ tak, že $f(a, b) = 0$ a $f_y(a, b) : Y \rightarrow Z$ je izomorfismus Banachových prostorů. Potom existují U okolí a , V okolí b a F-diferencovatelná $g : U \rightarrow V$ tak, že $f(x, g(x)) = 0$

Pro praktický výpočet se pak hodí věta, která nám umožní derivace spočítat jednodušeji než přímo z definice.

Věta 4. Buď $f : X \rightarrow \mathbb{R}$, pro $x, v \in X$, $\varepsilon > 0$ definujeme $h : (-\varepsilon, \varepsilon) \rightarrow \mathbb{R}$ jako $h(t) := f(x + tv)$. Pak

$$\delta f(x; v) = \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} h(t) = \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} f(x + tv).$$

Nakonec pak budeme potřebovat následující dvě věty, které nám umožní realizovat samotnou myšlenku metody adjungované rovnice.

Věta 5 (Rieszova). Necht' H je Hilbertův prostor a $F : H \rightarrow \mathbb{C}$ omezený lineární funkcionál. Potom existuje právě jeden vektor $y \in H$ takový, že

$$Fx = \langle x, y \rangle \quad \forall x \in H.$$

Věta 6 (O sdruženém operátoru). Necht' H, K jsou Hilbertovy prostory, $A : H \rightarrow K$ je omezený lineární operátor. Pak existuje právě jeden omezený lineární operátor $A^* : K \rightarrow H$ takový, že

$$\langle Ax, y \rangle_K = \langle x, A^*y \rangle_H, \quad \forall x \in H, y \in K,$$

A^* nazýváme sdružený operátor k A .

Kapitola 2

Metoda adjungované rovnice

V této kapitole si představíme metodu adjungované rovnice. Ta spočívá v zavedení nové (adjungované) proměnné, pro kterou následně formulujeme tzv. adjungovanou rovnici. Při jejím splnění se pak velmi výrazně zjednoduší výpočet gradientu účelové funkce pro potřeby optimalizace.

2.1 Obecná formulace

Nejprve se podíváme na obecnou formulaci optimalizační úlohy s vazbou danou parciálními diferenciálními rovnicemi a její řešení pomocí metody adjungované rovnice.

Buďte S, Y, Z Banachovy prostory, $s \in S$ představuje řízení úlohy, $y \in Y$ její řešení. Naším cílem je

$$\min_{y \in Y, s \in S} J(y, s), \quad \text{za podmínky } e(y, s) = 0, \quad (2.1)$$

kde $J : Y \times S \rightarrow \mathbb{R}$ je účelová funkce, $e : Y \times S \rightarrow Z$ představuje soustavu PDR s okrajovými a počátečními podmínkami. Pokud navíc předpokládáme pro každé $s \in S$ jednoznačné řešení soustavy $e(y, s) = 0$, můžeme optimalizační problém převést na tvar

$$\min_{s \in S} \hat{J}(s) := J(y(s), s), \quad \text{za podmínky } e(y(s), s) = 0.$$

Minimalizaci účelové funkce budeme provádět numericky pomocí gradientního sestupu, proto se nyní pokusíme nalézt gradient $\hat{J}'(s)$. K tomu využijeme Lagrangeovu funkci

$$L(y, s, \lambda) = J(y, s) + \langle \lambda, e(y, s) \rangle_Z,$$

kde $\lambda \in Z$ nazýváme adjungovaná proměnná. Pokud uvažujeme $y = y(s)$, dostaneme pro libovolné $\lambda \in Z$

$$L(y(s), s, \lambda) = J(y(s), s) + \langle \lambda, e(y(s), s) \rangle_Z = J(y(s), s) = \hat{J}(s).$$

Pro další postup je potřeba, aby byly splněny zejména předpoklady věty o implicitní funkci pro vazbu $e(y, s) = 0$:

- (i) e, J jsou spojitě F-diferencovatelné,
- (ii) $\forall s \in S : \exists_1 y \in Y : e(y, s) = 0$,

(iii) $\forall s \in S : e_y(y(s), s)$ je izomorfismus Banachových prostorů.

Za použití vět 1, 2 a 3 z předchozí části dostaneme pro F-derivaci $\hat{J}(s)$ ve směru $q \in S$:

$$\begin{aligned} \hat{J}'(s)[q] &= L_s(y(s), s, \lambda)[q] = \\ &= J_y(y(s), s)[y'(s)[q]] + J_s(y(s), s)[q] + \langle \lambda, e_y(y(s), s)[y'(s)[q]] + e_s(y(s), s)[q] \rangle_Z. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Derivací skalárního součinu dostaneme opět skalární součin, protože se jedná o omezený lineární funkcionál (Poznámka 1). Dále výraz upravíme za použití Rieszovy věty a věty o sdruženém operátoru.

$$\begin{aligned} \hat{J}'(s)[q] &= \langle \tilde{J}_y, y'(s)[q] \rangle_Y + J_s(y(s), s)[q] + \langle e_y(y(s), s)^* \lambda, y'(s)[q] \rangle_Y + \langle \lambda, e_s(y(s), s)[q] \rangle_Z = \\ &= \langle \tilde{J}_y + e_y(y(s), s)^* \lambda, y'(s)[q] \rangle_Y + J_s(y(s), s)[q] + \langle \lambda, e_s(y(s), s)[q] \rangle_Z, \end{aligned} \quad (2.3)$$

kde $\tilde{J}_y \in Y$ nahrazuje $J_y(y(s), s)$ podle Rieszovy věty a $e_y(y(s), s)^*$ je sdružený operátor k $e_y(y(s), s)$. Pokud nyní zvolíme takové λ_0 , aby byla splněná **tzv. adjungovaná rovnice**

$$\tilde{J}_y + e_y(y(s), s)^* \lambda_0 = 0, \quad (2.4)$$

můžeme získat $\hat{J}'(s)$ jako

$$\hat{J}'(s)[q] = L_s(y(s), s, \lambda_0)[q] = J_s(y(s), s)[q] + \langle \lambda_0, e_s(y(s), s)[q] \rangle_Z, \quad (2.5)$$

tedy bez nutnosti výpočtu $y'(s)$. Podmínka (2.4) je ekvivalentní s

$$L_y(y(s), s, \lambda_0) = 0, \quad (2.6)$$

jelikož provedením stejných úprav jako v postupu výše dostaneme

$$\begin{aligned} L_y(y(s), s, \lambda) &= J_y(y(s), s)[y'(s)[q]] + \langle \lambda, e_y(y(s), s)[y'(s)[q]] \rangle_Z \\ &= \langle \tilde{J}_y + e_y(y(s), s)^* \lambda, y'(s)[q] \rangle_Y \end{aligned} \quad (2.7)$$

Jelikož ale naším cílem je pouze numerické řešení úlohy, budeme při aplikaci na model fázového pole postup dodržovat čistě formálně a nebudeme ověřovat většinu předpokladů. Například budeme počítat pouze směrové derivace a nebudeme zkoumat, zda splňují podmínky, aby se jednalo o Fréchetovu derivaci. Také nepoužijeme sdružený operátor, jeho roli bude zastávat použití první Greenovy identity [9]. Rieszovu větu taktéž nebude třeba použít, protože $J_y(y(s), s)[y'(s)[q]]$ už bude mít tvar skalárního součinu (integrálu).

Poznámka 2. Zde je vhodné více ozřejmit, proč je pro nás vlastně výhodné se vyhnout výpočtu $y'(s)[q]$. Tuto derivaci bychom mohli aproximovat pomocí výrazu $\frac{y(s+\varepsilon q) - y(s)}{\varepsilon}$, $\varepsilon > 0$. Ten bychom ale potřebovali získat pro velké množství různých q , konkrétně tolik, jaká bude dimenze prostoru S po diskretizaci. A jelikož $y(s)$ představuje řešení soustavy PDR a závisí mimo jiné na s , museli bychom soustavu řešit pro každou volbu q znovu.

2.2 Adjungovaná rovnice pro model fázového pole

V této části aplikujeme metodu adjungované rovnice na problém popsany v první kapitole. Chceme tedy pro model fázového pole (1.6)-(1.11) nalézt takové okrajové podmínky (funkci

s), abychom v čase T dostali krystal předepsaného tvaru (funkci y_f). Naše účelová funkce bude

$$J = \frac{1}{2} \int_{\Omega} (y|_{t=T} - y_f)^2 dx + \frac{\gamma}{2} \int_0^T \int_{\partial\Omega} |s - u_{\text{mt}}|^2 dx dt, \quad (2.8)$$

kde první člen představuje normu rozdílu předepsaného profilu a dosaženého výsledku v čase T , reprezentuje tedy kvalitu nalezeného řízení. Druhý člen představuje Tichonovovu regularizaci. Ta má obecně za účel posunout řešení blíže k počátku, v našem případě k teplotě tání. Díky tomu jsou upřednostňována řešení s menšími teplotními výkyvy.

K odvození adjungované rovnice pro tuto úlohu lze použít také méně obecný postup, ve kterém řízení úlohy probíhá pomocí konečného počtu parametrů. Tento přístup je více intuitivní a pro jeho použití nejsou potřeba znalosti z funkcionální analýzy, může být tedy lepší pro první seznámení s výpočtem. Z tohoto důvodu zde budou oba postupy uvedeny v plné délce, přestože jsou podobné a vedou ke stejným výsledkům.

2.2.1 Parametrický přístup

V tomto přístupu k adjungované metodě uvažujeme řízení úlohy pomocí konečného vektoru parametrů \vec{p} , tedy $s = s(\vec{p})$. Tento přístup počítá s následnou diskretizací úlohy, při které také ozřejmíme význam zavedených parametrů. Naším cílem je minimalizovat funkcionál

$$J(\vec{p}) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} (y(\vec{p})|_{t=T} - y_f)^2 dx + \frac{\gamma}{2} \int_0^T \int_{\partial\Omega} |s(\vec{p}) - u_{\text{mt}}|^2 dx dt, \quad (2.9)$$

Minimalizaci provádíme za podmínek daných rovnicemi pro model fázového pole, tedy

$$u_t - \Delta u = Ly_t \quad \text{na } \Omega \times (0, T), \quad (2.10)$$

$$y_t - \frac{1}{\alpha} \Delta y = \frac{1}{\alpha \xi^2} f(u, y, \xi) \quad \text{na } \Omega \times (0, T), \quad (2.11)$$

$$f(u, y, \xi) = 2y(1-y) \left(y - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \beta b \xi \Sigma(y) (u - u_{\text{mt}}) \right), \quad (2.12)$$

$$u|_{\partial\Omega} = s \quad \text{na } \partial\Omega \times [0, T], \quad (2.13)$$

$$y|_{\partial\Omega} = g \quad \text{na } \partial\Omega \times [0, T], \quad (2.14)$$

$$u|_{t=0} = u_0 \quad \text{na } \Omega, \quad (2.15)$$

$$y|_{t=0} = y_0 \quad \text{na } \Omega. \quad (2.16)$$

Pro funkce z modelu pak platí

$$\begin{aligned} u &= u(x, t, \vec{p}), & y &= y(x, t, \vec{p}), \\ s &= s(x, t, \vec{p}), & g &= g(x, t), \\ u_0 &= u_0(x), & y_0 &= y_0(x), \end{aligned}$$

jelikož nastavení parametrů ovlivní časový vývoj u a y . Pro přehlednost zápisu ale nebudeme tyto závislosti dále explicitně psát. Minimalizace v tomto případě představuje hledání vázaného extrému, k čemuž použijeme metodu Lagrangeových multiplikátorů.

Zavedeme funkce

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= \lambda_1(x, t), & \mu_1 &= \mu_1(x, t) & \text{na } \Omega \times [0, T], \\ \lambda_2 &= \lambda_2(x, t), & \mu_2 &= \mu_2(x, t) & \text{na } \partial\Omega \times [0, T], \\ \lambda_3 &= \lambda_3(x), & \mu_3 &= \mu_3(x) & \text{na } \Omega\end{aligned}$$

a definujeme funkcionál $J^*(\vec{p})$ jako

$$\begin{aligned}J^*(\vec{p}) &= \int_0^T \int_{\Omega} \lambda_1 (u_t - \Delta u - Ly_t) \, dx \, dt + \int_0^T \int_{\partial\Omega} \frac{\gamma}{2} |s - u_{\text{mt}}|^2 + \lambda_2 (u - s) \, dx \, dt \\ &+ \int_{\Omega} \lambda_3 (u|_{t=0} - u_0) \, dx \\ &+ \int_0^T \int_{\Omega} \mu_1 \left(y_t - \frac{1}{\alpha} \Delta y - \frac{2}{\alpha \xi^2} y (1 - y) \left(y - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \beta b \xi \Sigma(y) (u - u_{\text{mt}}) \right) \right) \, dx \, dt \\ &+ \int_0^T \int_{\partial\Omega} \mu_2 (y - g) \, dx \, dt + \int_{\Omega} \frac{1}{2} (y|_{t=T} - y_f)^2 + \mu_3 (y|_{t=0} - y_0) \, dx.\end{aligned}\tag{2.17}$$

Vidíme, že při splnění rovnic (2.10)-(2.16) je $J^*(p) = J(p)$. Následně budeme chtít počítat gradient $\nabla J^*(\vec{p}) = \frac{dJ^*}{d\vec{p}}$. Pokud bychom ale funkcionál nyní zderivovali, dostali bychom výrazy typu $\frac{\partial(\Delta u)}{\partial \vec{p}}$ a $\frac{\partial(u_t)}{\partial \vec{p}}$, se kterými by bylo těžké dále pracovat. Proto nejprve převedeme derivace podle prostorových proměnných a času na funkce λ_1 a μ_1 . K tomu použijeme metodu per partes a první Greenovu identitu [9].

Pomocí per partes (u integrálu přes čas) upravíme člen

$$\int_0^T \int_{\Omega} \lambda_1 u_t \, dx \, dt = \int_{\Omega} (\lambda_1 u)|_{t=T} - (\lambda_1 u)|_{t=0} \, dx - \int_0^T \int_{\Omega} \lambda_{1t} u \, dx \, dt,\tag{2.18}$$

a dvojitým použitím Greenovy identity (na prostorový integrál) získáme

$$\begin{aligned}- \int_0^T \int_{\Omega} \lambda_1 \Delta u \, dx \, dt &= \int_0^T \int_{\Omega} \nabla \lambda_1 \nabla u \, dx \, dt - \int_0^T \int_{\partial\Omega} \lambda_1 \nabla u \vec{n} \, dx \, dt \\ &= \int_0^T \int_{\partial\Omega} u \nabla \lambda_1 \vec{n} \, dx \, dt - \int_0^T \int_{\Omega} \Delta \lambda_1 u \, dx \, dt - \int_0^T \int_{\partial\Omega} \lambda_1 \nabla u \vec{n} \, dx \, dt.\end{aligned}\tag{2.19}$$

Stejným způsobem upravíme i členy s $L\lambda_1 y_t$, $\mu_1 y_t$ a $\mu_1 \Delta y$.

Po přerovnění pak dostaneme J^* ve tvaru

$$\begin{aligned}
J^*(\vec{p}) &= \int_0^T \int_{\Omega} -\lambda_{1t} u - \Delta \lambda_1 u \, dx \, dt \\
&+ \int_0^T \int_{\Omega} -\mu_{1t} y - \frac{1}{\alpha} \Delta \mu_1 y + L \lambda_{1t} y + \frac{\mu_1}{\alpha \xi^2} (2y^3 - 3y^2 + y) \, dx \, dt \\
&+ \int_0^T \int_{\Omega} \frac{\mu_1 \beta b}{\alpha \xi} (u - u_{mt}) (y \Sigma(y) - y^2 \Sigma(y)) \, dx \, dt \\
&+ \int_0^T \int_{\partial \Omega} \frac{\gamma}{2} |s - u_{mt}|^2 + \lambda_2 (u - s) + u \nabla \lambda_1 \vec{n} - \lambda_1 \nabla u \vec{n} \, dx \, dt \\
&+ \int_0^T \int_{\partial \Omega} \mu_2 (y - g) + \frac{1}{\alpha} y \nabla \mu_1 \vec{n} - \frac{1}{\alpha} \mu_1 \nabla y \vec{n} \, dx \, dt \\
&+ \int_{\Omega} \frac{1}{2} (y|_{t=T} - y_f)^2 + (\lambda_3 - \lambda_1)|_{t=0} u|_{t=0} - \lambda_3 u_0 + (\lambda_1 u)|_{t=T} \, dx \\
&+ \int_{\Omega} \mu_3 (y|_{t=0} - y_0) - (\mu_1 y)|_{t=0} + (\mu_1 y)|_{t=T} \, dx + L (\lambda_1 y)|_{t=0} - L (\lambda_1 y)|_{t=T} \, dx.
\end{aligned} \tag{2.20}$$

Nyní už zderivujeme J^* podle parametrů \vec{p} a prohodíme derivaci s integrálem.

$$\begin{aligned}
\frac{dJ^*}{d\vec{p}} &= \int_0^T \int_{\Omega} \left(-\lambda_{1t} - \Delta \lambda_1 + \frac{\beta b}{\alpha \xi} \mu_1 (y \Sigma(y) - y^2 \Sigma(y)) \right) \frac{\partial u}{\partial \vec{p}} \, dx \, dt \\
&+ \int_0^T \int_{\Omega} \left(-\mu_{1t} - \frac{1}{\alpha} \Delta \mu_1 + L \lambda_{1t} + \frac{\mu_1}{\alpha \xi^2} (6y^2 - 6y + 1) \right) \frac{\partial y}{\partial \vec{p}} \, dx \, dt \\
&+ \int_0^T \int_{\Omega} \underbrace{\left(\mu_1 \frac{\beta b}{\alpha \xi} (u - u_{mt}) (\Sigma(y) + y \Sigma'(y) - 2y \Sigma(y) - y^2 \Sigma'(y)) \right)}_{=l(y,u)} \frac{\partial y}{\partial \vec{p}} \, dx \, dt \\
&+ \int_0^T \int_{\partial \Omega} (\gamma (s - u_{mt}) - \lambda_2) \frac{\partial s}{\partial \vec{p}} \, dx \, dt + \int_0^T \int_{\partial \Omega} (\lambda_2 + \nabla \lambda_1 \vec{n}) \frac{\partial u}{\partial \vec{p}} \, dx \, dt \\
&- \int_0^T \int_{\partial \Omega} \lambda_1 \frac{\partial}{\partial \vec{p}} (\nabla u \vec{n}) \, dx \, dt + \int_0^T \int_{\partial \Omega} \left(\mu_2 + \frac{1}{\alpha} \nabla \mu_1 \vec{n} \right) \frac{\partial y}{\partial \vec{p}} \, dx \, dt \\
&- \int_0^T \int_{\partial \Omega} \frac{1}{\alpha} \mu_1 \frac{\partial}{\partial \vec{p}} (\nabla y \vec{n}) \, dx \, dt + \int_{\Omega} (\lambda_3 - \lambda_1)|_{t=0} \frac{\partial u}{\partial \vec{p}} \Big|_{t=0} \, dx \\
&+ \int_{\Omega} \left(\lambda_1 \frac{\partial u}{\partial \vec{p}} \right) \Big|_{t=T} \, dx + \int_{\Omega} (y|_{t=T} - y_f + \mu_1|_{t=T} - L \lambda_1|_{t=T}) \frac{\partial y}{\partial \vec{p}} \Big|_{t=T} \, dx \\
&+ \int_{\Omega} (\mu_3 - \mu_1|_{t=0} + L \lambda_1|_{t=0}) \frac{\partial y}{\partial \vec{p}} \Big|_{t=0} \, dx.
\end{aligned} \tag{2.21}$$

Naším cílem je vyhnout se výpočtu $\frac{\partial u}{\partial \vec{p}}$ a $\frac{\partial y}{\partial \vec{p}}$, který by byl numericky velmi náročný. Toho můžeme dosáhnout vynulováním výrazů vystupujících před těmito derivacemi. To znamená vyřešení rovnic

$$\lambda_{1t} + \Delta \lambda_1 = \frac{\beta b}{\alpha \xi} \mu_1 (y \Sigma(y) - y^2 \Sigma(y)) \quad \text{na } \Omega \times (0, T), \quad (2.22)$$

$$\mu_{1t} + \frac{1}{\alpha} \Delta \mu_1 = L \lambda_{1t} + \frac{\mu_1}{\alpha \xi^2} (6y^2 - 6y + 1) + \mu_1 l(y, u) \quad \text{na } \Omega \times (0, T), \quad (2.23)$$

s podmínkami

$$\lambda_1|_{\partial \Omega} = 0 \quad \text{na } \partial \Omega \times [0, T], \quad (2.24)$$

$$\mu_1|_{\partial \Omega} = 0 \quad \text{na } \partial \Omega \times [0, T], \quad (2.25)$$

$$\lambda_1|_{t=T} = 0 \quad \text{na } \Omega, \quad (2.26)$$

$$\mu_1|_{t=T} = y_f - y|_{t=T} + L \lambda_1|_{t=T} \quad \text{na } \Omega, \quad (2.27)$$

kde v poslední rovnici je člen $L \lambda_1|_{t=T} = 0$. Zbylé multiplikátory pak nastavíme jako

$$\lambda_2 = -\nabla \lambda_1 \vec{n} \quad \text{na } \partial \Omega \times [0, T], \quad (2.28)$$

$$\mu_2 = -\frac{1}{\alpha} \nabla \mu_1 \vec{n} \quad \text{na } \partial \Omega \times [0, T], \quad (2.29)$$

$$\lambda_3 = \lambda_1|_{t=0} \quad \text{na } \Omega, \quad (2.30)$$

$$\mu_3 = (\mu_1 - L \lambda_1)|_{t=0} \quad \text{na } \Omega. \quad (2.31)$$

Soustava rovnic (2.22) a (2.23) je ale špatně položená, navíc pro ni máme jen podmínku na koncový stav. To vyřešíme zavedením veličin

$$\begin{aligned} \lambda(t) &= \lambda_1(T - t), \\ \mu(t) &= \mu_1(T - t), \\ z(t) &= y(T - t), \\ v(t) &= u(T - t), \end{aligned} \quad (2.32)$$

čímž získáme soustavu rovnic s počátečními a okrajovými podmínkami

$$\lambda_t = \Delta \lambda - \frac{\beta b}{\alpha \xi} \mu \Sigma(z) (z - z^2) \quad \text{na } \Omega \times (0, T), \quad (2.33)$$

$$\mu_t = \frac{1}{\alpha} \Delta \mu + L \lambda_t + \frac{\mu}{\alpha \xi^2} \left(-3z^2 + 3z - \frac{1}{2} \right) - \mu l(z, v) \quad \text{na } \Omega \times (0, T), \quad (2.34)$$

$$\lambda|_{\partial \Omega} = 0 \quad \text{na } \partial \Omega \times [0, T], \quad (2.35)$$

$$\mu|_{\partial \Omega} = 0 \quad \text{na } \partial \Omega \times [0, T], \quad (2.36)$$

$$\lambda|_{t=0} = 0 \quad \text{na } \Omega, \quad (2.37)$$

$$\mu|_{t=0} = y_f - y|_{t=T} \quad \text{na } \Omega, \quad (2.38)$$

kde

$$l(z, v) = \frac{\beta b}{\alpha \xi} (v - u_{mt}) \left(\Sigma(z) (1 - 2z) + \Sigma'(z) (z - z^2) \right). \quad (2.39)$$

Po vyřešení této soustavy a nastavení zbývajících multiplikátorů podle (2.28)-(2.31) dostaneme gradient $J^*(\vec{p})$ v jednoduchém tvaru

$$\frac{dJ^*}{d\vec{p}} = \int_0^T \int_{\partial \Omega} (\gamma (s - u_{mt}) - \lambda_2) \frac{\partial s}{\partial \vec{p}} dx dt. \quad (2.40)$$

2.2.2 Variační přístup

V této části budeme postupovat podle obecné teorie v sekci 2.1. Konkrétní formulace úlohy (2.1) je v našem případě následující:

$$\min_{s \in S} J(u(s), y(s), s) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} (y(s)|_{t=T} - y_f)^2 dx + \frac{\gamma}{2} \int_0^T \int_{\partial\Omega} |s - u_{\text{mt}}|^2 dx dt, \quad (2.41)$$

za podmínek daných rovnicemi fázového pole, tedy

$$u_t = \Delta u + Ly_t \quad \text{na } \Omega \times (0, T), \quad (2.42)$$

$$\alpha \xi^2 y_t = \xi^2 \Delta y + f(u, y, \xi) \quad \text{na } \Omega \times (0, T), \quad (2.43)$$

$$f(u, y, \xi) = 2y(1-y) \left(y - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} b \beta \xi \Sigma(y) (u - u_{\text{mt}}) \right),$$

$$u|_{t=0} = u_0 \quad \text{na } \Omega, \quad (2.44)$$

$$y|_{t=0} = y_0 \quad \text{na } \Omega, \quad (2.45)$$

$$u|_{\partial\Omega} = s \quad \text{na } \partial\Omega \times [0, T], \quad (2.46)$$

$$y|_{\partial\Omega} = g \quad \text{na } \partial\Omega \times [0, T]. \quad (2.47)$$

Zde předpokládáme jednoznačné řešení $(u, y) = (u(s), y(s))$, kvůli přehlednosti ale tuto závislost nebudeme vypisovat. Také pro krátkost a soulad s parametrickým přístupem budeme dále adjungované proměnné nazývat multiplikátory. Objekty z obecné teorie pak v tomto případě budou:

- $Y \equiv C^2(\bar{K})^2$, kde $K \equiv \Omega \times (0, T)$,
- $S \equiv C(\partial\Omega \times [0, T])$,
- $Z \equiv L^2(\bar{K})^2 \times L^2(\partial\Omega \times [0, T])^2 \times L^2(\Omega)^2$,
- $\lambda \equiv (\lambda_1, \mu_1, \lambda_2, \mu_2, \lambda_3, \mu_3)$,
- operátor e definujeme po složkách:

$$\begin{aligned} e^1(u, y) &= u_t - \Delta u - Ly_t, \\ e^2(u, y) &= y_t - \frac{1}{\alpha} \Delta y - \frac{1}{\alpha \xi^2} f(u, y, \xi), \\ e^3(u, s) &= u|_{\partial\Omega} - s, \\ e^4(y) &= y|_{\partial\Omega} - g, \\ e^5(u) &= u|_{t=0} - u_0, \\ e^6(y) &= y|_{t=0} - y_0. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Stejně jako v postupu z Kapitoly 2.1 definujeme Lagrangeovu funkci

$$\begin{aligned}
L(u, y, s, \lambda) &= J(u, y, s) + \langle \lambda, e(u, y, s) \rangle \\
&= \int_0^T \int_{\Omega} \lambda_1 (u_t - \Delta u - Ly_t) \, dx \, dt + \int_0^T \int_{\partial\Omega} \frac{\gamma}{2} |s - u_{\text{mt}}|^2 + \lambda_2 (u - s) \, dx \, dt \\
&\quad + \int_{\Omega} \lambda_3 (u|_{t=0} - u_0) \, dx \\
&\quad + \int_0^T \int_{\Omega} \mu_1 \left(y_t - \frac{1}{\alpha} \Delta y - \frac{2}{\alpha \xi^2} y (1 - y) \left(y - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \beta b \xi \Sigma(y) (u - u_{\text{mt}}) \right) \right) \, dx \, dt \\
&\quad + \int_0^T \int_{\partial\Omega} \mu_2 (y - g) \, dx \, dt + \int_{\Omega} \frac{1}{2} (y|_{t=T} - y_f)^2 + \mu_3 (y|_{t=0} - y_0) \, dx.
\end{aligned} \tag{2.49}$$

Nyní převedeme derivace na multiplikátory λ pomocí první Greenovy identity [9] a metody per partes, což nahrazuje použití sdruženého operátoru. V obecném postupu jsme sice účelovou funkci nejprve zderivovali a až následně prováděli tyto úpravy, nicméně na pořadí kroků v našem případě nezáleží. Naopak toto uspořádání může být pro samotný výpočet o něco přehlednější.

Za použití per partes (na integrál přes čas) upravíme člen

$$\int_0^T \int_{\Omega} \lambda_1 u_t \, dx \, dt = \int_{\Omega} (\lambda_1 u)|_{t=T} - (\lambda_1 u)|_{t=0} \, dx - \int_0^T \int_{\Omega} \lambda_{1t} u \, dx \, dt, \tag{2.50}$$

a dvojitým použitím Greenovy identity (na prostorový integrál) získáme

$$\begin{aligned}
- \int_0^T \int_{\Omega} \lambda_1 \Delta u \, dx \, dt &= \int_0^T \int_{\Omega} \nabla \lambda_1 \nabla u \, dx \, dt - \int_0^T \int_{\partial\Omega} \lambda_1 \nabla u \vec{n} \, dx \, dt \\
&= \int_0^T \int_{\partial\Omega} u \nabla \lambda_1 \vec{n} \, dx \, dt - \int_0^T \int_{\Omega} \Delta \lambda_1 u \, dx \, dt - \int_0^T \int_{\partial\Omega} \lambda_1 \nabla u \vec{n} \, dx \, dt,
\end{aligned} \tag{2.51}$$

kde \vec{n} je normálový vektor k $\partial\Omega$. Stejným způsobem upravíme i členy s $L\lambda_1 y_t$, $\mu_1 y_t$ a $\frac{1}{\alpha} \mu_1 \Delta y$. Po přerovnání výrazů a roznásobení polynomu dostaneme

$$\begin{aligned}
L(u, y, s, \lambda) &= \\
&= \int_0^T \int_{\Omega} -\lambda_{1t} u - \Delta \lambda_1 u \, dx \, dt \\
&+ \int_0^T \int_{\Omega} -\mu_{1t} y - \frac{1}{\alpha} \Delta \mu_1 y + L \lambda_{1t} y + \frac{2\mu_1}{\alpha \xi^2} \left(y^3 - \frac{3}{2} y^2 + \frac{1}{2} y \right) \, dx \, dt \\
&+ \int_0^T \int_{\Omega} \frac{\mu_1 \beta b}{\alpha \xi} (u - u_{mt}) (y \Sigma(y) - y^2 \Sigma(y)) \, dx \, dt \\
&+ \int_0^T \int_{\partial \Omega} \frac{\gamma}{2} |s - u_{mt}|^2 + \lambda_2 (u - s) + u \nabla \lambda_1 \vec{n} - \lambda_1 \nabla u \vec{n} \, dx \, dt \tag{2.52} \\
&+ \int_0^T \int_{\partial \Omega} \mu_2 (y - g) + \frac{1}{\alpha} y \nabla \mu_1 \vec{n} - \frac{1}{\alpha} \mu_1 \nabla y \vec{n} \, dx \, dt \\
&+ \int_{\Omega} (\lambda_3 - \lambda_1)|_{t=0} u|_{t=0} - \lambda_3 u_0 + (\lambda_1 u)|_{t=T} \, dx \\
&+ \int_{\Omega} \frac{1}{2} (y|_{t=T} - y_f)^2 + \mu_3 (y|_{t=0} - y_0) - (\mu_1 y)|_{t=0} + (\mu_1 y)|_{t=T} + L (\lambda_1 y)|_{t=0} - L (\lambda_1 y)|_{t=T} \, dx.
\end{aligned}$$

Dále chceme splnit podmínku (2.6), která je ekvivalentní se splněním adjungované rovnice, a pro $(\hat{u}, \hat{y}) \in Y$ má tvar

$$L_{(u,y)}(u, y, s, \lambda)[(\hat{u}, \hat{y})] = 0. \tag{2.53}$$

Výpočet derivace je v tomto případě jednoduchý, pro názornost ji zde alespoň pro jeden člen spočítáme. Použijeme k tomu Větu 4.

$$\delta \left(\int_0^T \int_{\Omega} \frac{2\mu_1}{\alpha \xi^2} y^3 \right) ((u, y); (\hat{u}, \hat{y})) = \frac{d}{dt} \Big|_{t=0} \int_0^T \int_{\Omega} \frac{2\mu_1}{\alpha \xi^2} (y + t\hat{y})^3 = \int_0^T \int_{\Omega} \frac{6\mu_1}{\alpha \xi^2} y^2 \hat{y}. \tag{2.54}$$

Celkově pak máme

$$\begin{aligned}
& L_{(u,y)}(u, y, s, \lambda)[(\hat{u}, \hat{y})] = \\
& = \int_0^T \int_{\Omega} \left(-\lambda_{1t} - \Delta\lambda_1 + \frac{\beta b}{\alpha \xi} \mu_1 (y\Sigma(y) - y^2\Sigma(y)) \right) \hat{u} \, dx \, dt \\
& + \int_0^T \int_{\Omega} \left(-\mu_{1t} - \frac{1}{\alpha} \Delta\mu_1 + L\lambda_{1t} + \frac{\mu_1}{\alpha \xi^2} (6y^2 - 6y + 1) \right) \hat{y} \, dx \, dt \\
& + \int_0^T \int_{\Omega} \left(\underbrace{\mu_1 \frac{\beta b}{\alpha \xi} (u - u_{mt}) (\Sigma(y) + y\Sigma'(y) - 2y\Sigma(y) - y^2\Sigma'(y))}_{=l(u,y)} \right) \hat{y} \, dx \, dt \\
& + \int_0^T \int_{\partial\Omega} (\lambda_2 + \nabla\lambda_1 \vec{n}) \hat{u} \, dx \, dt \tag{2.55} \\
& - \int_0^T \int_{\partial\Omega} \lambda_1 \nabla \hat{u} \vec{n} \, dx \, dt + \int_0^T \int_{\partial\Omega} \left(\mu_2 + \frac{1}{\alpha} \nabla\mu_1 \vec{n} \right) \hat{y} \, dx \, dt \\
& - \int_0^T \int_{\partial\Omega} \frac{1}{\alpha} \mu_1 \nabla \hat{y} \vec{n} \, dx \, dt + \int_{\Omega} (\lambda_3 - \lambda_1)|_{t=0} \hat{u}|_{t=0} \, dx \\
& + \int_{\Omega} (\lambda_1 \hat{u})|_{t=T} \, dx + \int_{\Omega} (y|_{t=T} - y_f + \mu_1|_{t=T} - L\lambda_1|_{t=T}) \hat{y}|_{t=T} \, dx \\
& + \int_{\Omega} (\mu_3 - \mu_1|_{t=0} + L\lambda_1|_{t=0}) \hat{y}|_{t=0} \, dx.
\end{aligned}$$

Aby tento výraz byl roven nule pro všechna $(\hat{u}, \hat{y}) \in Y$, musí být nulové výrazy vystupující před nimi. Toho dosáhneme vhodným nastavením multiplikátorů, což znamená řešení rovnic

$$\lambda_{1t} + \Delta\lambda_1 = \frac{\beta b}{\alpha \xi} \mu_1 (y\Sigma(y) - y^2\Sigma(y)) \quad \text{na } \Omega \times (0, T), \tag{2.56}$$

$$\mu_{1t} + \frac{1}{\alpha} \Delta\mu_1 = L\lambda_{1t} + \frac{\mu_1}{\alpha \xi^2} (6y^2 - 6y + 1) + \mu_1 l(u, y) \quad \text{na } \Omega \times (0, T), \tag{2.57}$$

s podmínkami

$$\lambda_1|_{\partial\Omega} = 0 \quad \text{na } \partial\Omega \times [0, T], \tag{2.58}$$

$$\mu_1|_{\partial\Omega} = 0 \quad \text{na } \partial\Omega \times [0, T], \tag{2.59}$$

$$\lambda_1|_{t=T} = 0 \quad \text{na } \Omega, \tag{2.60}$$

$$\mu_1|_{t=T} = y_f - y|_{t=T} + L\lambda_1|_{t=T} \quad \text{na } \Omega, \tag{2.61}$$

kde v poslední rovnici je člen $L\lambda_1|_{t=T} = 0$. Zbylé multiplikátory pak nastavíme jako

$$\lambda_2 = -\nabla\lambda_1 \vec{n} \quad \text{na } \partial\Omega \times [0, T], \tag{2.62}$$

$$\mu_2 = -\frac{1}{\alpha} \nabla\mu_1 \vec{n} \quad \text{na } \partial\Omega \times [0, T], \tag{2.63}$$

$$\lambda_3 = \lambda_1|_{t=0} \quad \text{na } \Omega, \tag{2.64}$$

$$\mu_3 = (\mu_1 - L\lambda_1)|_{t=0} \quad \text{na } \Omega. \tag{2.65}$$

Pro rovnice (2.56) a (2.57) máme ale zadaný pouze stav v čase T , musíme je tedy řešit zpětně v čase. To vyřešíme zavedením veličin

$$\begin{aligned}\lambda(t) &= \lambda_1(T - t), \\ \mu(t) &= \mu_1(T - t), \\ z(t) &= y(T - t), \\ v(t) &= u(T - t),\end{aligned}\tag{2.66}$$

čímž se také změnilo znaménko u časových derivací

$$\begin{aligned}\lambda_t &= -\lambda_{1t} \\ \mu_t &= -\mu_{1t}.\end{aligned}$$

Prostorové derivace tato transformace neovlivní. Výsledkem pak je dobře položená soustava rovnic s počátečními a okrajovými podmínkami

$$\lambda_t = \Delta\lambda - \frac{\beta b}{\alpha\xi} \mu \Sigma(z) (z - z^2) \quad \text{na } \Omega \times (0, T),\tag{2.67}$$

$$\mu_t = \frac{1}{\alpha} \Delta\mu + L\lambda_t + \frac{\mu}{\alpha\xi^2} (-6z^2 + 6z - 1) - \mu l(v, z) \quad \text{na } \Omega \times (0, T),\tag{2.68}$$

$$\lambda|_{\partial\Omega} = 0 \quad \text{na } \partial\Omega \times [0, T],\tag{2.69}$$

$$\mu|_{\partial\Omega} = 0 \quad \text{na } \partial\Omega \times [0, T],\tag{2.70}$$

$$\lambda|_{t=0} = 0 \quad \text{na } \Omega,\tag{2.71}$$

$$\mu|_{t=0} = y_f - y|_{t=T} \quad \text{na } \Omega,\tag{2.72}$$

kde

$$l(v, z) = \frac{\beta b}{\alpha\xi} (v - u_{mt}) \left(\Sigma(z) (1 - 2z) + \Sigma'(z) (z - z^2) \right).\tag{2.73}$$

Po vyřešení soustavy rovnic (2.67)-(2.72) a nastavení ostatních multiplikátorů podle (2.62)-(2.65), můžeme spočítat $\hat{J}'(s)[q]$, $q \in S$ podle (2.5):

$$\hat{J}'(s)[q] = L_s(y(s), s, \lambda_0)[q] = \int_0^T \int_{\partial\Omega} \gamma(s - u_{mt}) q - \lambda_2 q \, dx \, dt.\tag{2.74}$$

Poznámka 3. Řešení rovnic (2.67)-(2.72) nezávisí na konkrétní volbě q . Toho budeme využívat při numerickém počítání gradientu, kdy můžeme volit postupně různá q bez nutnosti řešit rovnice pro λ a μ pokaždé znovu.

Kapitola 3

Numerické řešení úlohy

Pro numerické řešení parciálních diferenciálních rovnic budeme používat metodu konečných diferencí [8], konkrétně její explicitní schéma. V této kapitole si pro ni zavedeme způsob diskretizace a odvodíme algebraické rovnice ke kterým vede. Dále si pak nastíníme implementaci celé optimalizační úlohy v jazyce C++.

3.1 Diskretizace

Oblast Ω volíme jako obdélník $(0, a) \times (0, b)$ a diskretizujeme ji pomocí pravidelné sítě s $n \cdot m$ uzly, $n, m \in \mathbb{N}$ (obr. 3.1). Síť má pak obecně prostorový krok $h_x = \frac{a}{n-1}$ a $h_y = \frac{b}{m-1}$, pro jednoduchost budeme ale volit takové nastavení diskretizace, aby $h_x = h_y = h$. V souvislosti s touto sítí budeme používat značení

$$\omega_h = \{(i \cdot h, j \cdot h) \mid i = 1, 2, \dots, n-2; j = 1, 2, \dots, m-2\},$$

pro vnitřní uzly sítě

$$\bar{\omega}_h = \{(i \cdot h, j \cdot h) \mid i = 0, 1, \dots, n-1; j = 0, 1, \dots, m-1\},$$

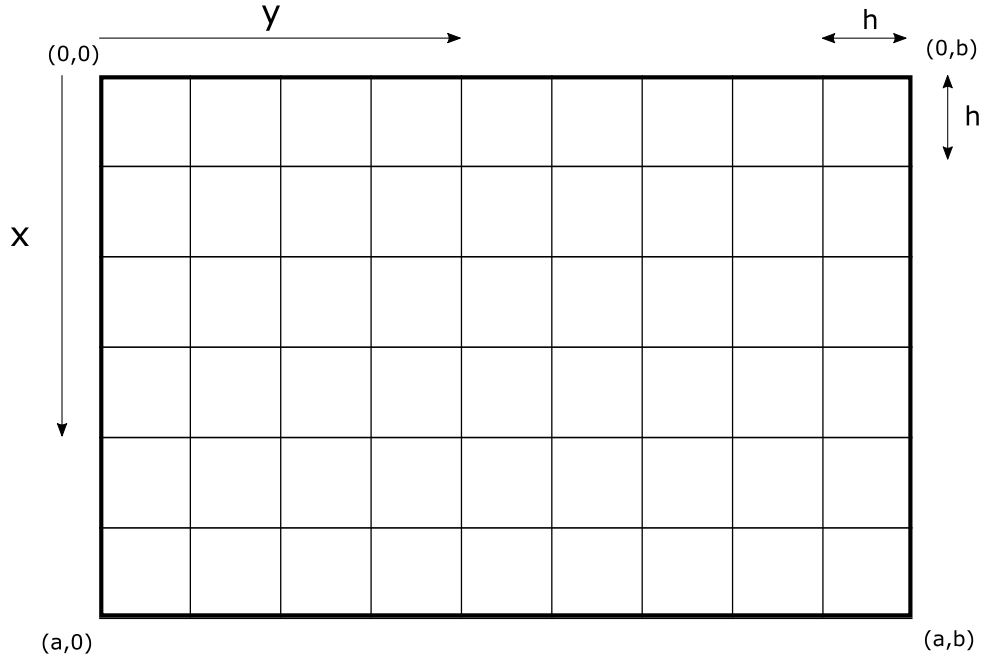
pro celou síť včetně okrajových uzlů a

$$\partial\omega_h = \bar{\omega}_h \setminus \omega_h,$$

pro okrajové uzly.

Časový krok τ volíme jako $\tau = c \cdot h^2$, $c > 0$, přičemž menší hodnoty c vedou k lepší numerické stabilitě. Kvadratickou závislost na prostorovém kroku h volíme kvůli podmínce stability pro explicitní schéma metody konečných diferencí. Počet časových hladin pak je $N = \frac{T}{\tau}$.

Poznámka 4. Zde se také dostáváme k místu, kde můžeme upřesnit význam parametrů \vec{p} z parametrického přístupu k adjungované rovnici. Jejich zavedení odpovídá diskretizaci okrajové podmínky, představují tedy hodnotu $s(\vec{p})$ na $\partial\omega_h$ v jednotlivých časových vrstvách.



Obrázek 3.1: Schéma diskretizace.

Poznámka 5. Oproti klasickému značení máme na obrázku 3.1 prohozené osy, tedy osa y míří ve vodorovném směru a počátek je v levém horním rohu oblasti. Díky tomu ale při implementaci bude oblast Ω odpovídat matici, a to včetně práce s indexy. První index bude odpovídat číslu řádku a druhý číslu sloupce.

Pro veličiny typu $A = A(x, y, t)$ budeme používat značení

$$\begin{aligned} A_{i,j}^k &:= A(i \cdot h, j \cdot h, k \cdot \tau), \quad i = 0, 1, \dots, n-1, \\ & \quad j = 0, 1, \dots, m-1, \\ & \quad k = 0, 1, \dots, N-1. \end{aligned} \quad (3.1)$$

V rovnicích, které budeme chtít řešit vystupují diferenciální výrazy typu Δu a $\frac{\partial u}{\partial t}$. Tyto členy nahradíme pomocí tzv. diferencí, ve kterých vystupují pouze hodnoty příslušných veličin v různých uzlech sítě. Pro $\frac{\partial u}{\partial t}$ použijeme dopřednou diferenci

$$\frac{\partial u}{\partial t} \Big|_{i,j}^k \approx \frac{u_{i,j}^{k+1} - u_{i,j}^k}{\tau} \quad \text{na } \bar{\omega}_h, \quad (3.2)$$

Δu nahradíme centrální diferencí pro druhou derivaci

$$\Delta u \Big|_{i,j}^k = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{i,j}^k + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \Big|_{i,j}^k \approx \frac{u_{i+1,j}^k + u_{i,j+1}^k - 4u_{i,j}^k + u_{i-1,j}^k + u_{i,j-1}^k}{h^2} \quad \text{na } \omega_h. \quad (3.3)$$

Stejným způsobem nahradíme i diferenciální výrazy pro ostatní veličiny.

Pro výpočet gradientu účelové funkce potřebujeme řešit soustavy rovnic (1.6)-(1.11) a (2.67)-(2.72). Vždy si nejprve připomeneme, o jaký systém rovnic se jedná a následně rozebereme jejich diskretizaci.

Primární rovnice pro u a y

$$u_t = \Delta u + Ly_t \quad \text{na } \Omega \times (0, T), \quad (3.4)$$

$$\alpha \xi^2 y_t = \xi^2 \Delta y + f(u, y, \xi) \quad \text{na } \Omega \times (0, T), \quad (3.5)$$

$$f(u, y, \xi) = 2y(1-y) \left(y - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} b \beta \xi \Sigma(y) (u - u_{\text{mt}}) \right),$$

s počátečními podmínkami

$$u|_{t=0} = u_0 \quad \text{na } \Omega, \quad (3.6)$$

$$y|_{t=0} = y_0 \quad \text{na } \Omega, \quad (3.7)$$

a Dirichletovými okrajovými podmínkami

$$u|_{\partial\Omega} = s \quad \text{na } \partial\Omega \times [0, T], \quad (3.8)$$

$$y|_{\partial\Omega} = g \quad \text{na } \partial\Omega \times [0, T]. \quad (3.9)$$

V těchto rovnicích nyní nahradíme diferenciální výrazy pomocí diferencí uvedených výše. Poté vyjádřením $u_{i,j}^{k+1}$, respektive $y_{i,j}^{k+1}$ získáme pro $k = 0, 1, \dots, N-2$

$$\begin{aligned} u_{i,j}^{k+1} &= u_{i,j}^k + \tau \frac{u_{i+1,j}^k + u_{i,j+1}^k - 4u_{i,j}^k + u_{i-1,j}^k + u_{i,j-1}^k}{h^2} \\ &\quad + L \left(y_{i,j}^{k+1} - y_{i,j}^k \right) \quad \text{na } \omega_h, \end{aligned} \quad (3.10)$$

$$\begin{aligned} y_{i,j}^{k+1} &= y_{i,j}^k + \tau \frac{y_{i+1,j}^k + y_{i,j+1}^k - 4y_{i,j}^k + y_{i-1,j}^k + y_{i,j-1}^k}{\alpha h^2} \\ &\quad + \frac{2\tau}{\alpha \xi^2} y_{i,j}^k \left(1 - y_{i,j}^k \right) \left(y_{i,j}^k - \frac{1}{2} - \frac{\beta b \xi}{2} \Sigma \left(y_{i,j}^k \right) \left(u_{i,j}^k - u_{\text{mt}} \right) \right) \quad \text{na } \omega_h, \end{aligned} \quad (3.11)$$

s počátečním nastavením

$$u_{i,j}^0 = u_0|_{i,j} \quad \text{na } \omega_h, \quad (3.12)$$

$$y_{i,j}^0 = y_0|_{i,j} \quad \text{na } \omega_h, \quad (3.13)$$

a okrajovými podmínkami

$$u_{i,j}^k = s_{i,j}^k \quad \text{na } \partial\omega_h, \quad (3.14)$$

$$y_{i,j}^k = g_{i,j}^k = 0 \quad \text{na } \partial\omega_h. \quad (3.15)$$

Z tohoto předpisu je zřejmé, že při implementaci musíme nejprve vypočítat $y_{i,j}^{k+1}$, které vystupuje v předpisu pro $u_{i,j}^{k+1}$. Stejný postup provedeme i u druhé soustavy rovnic.

Adjungovaná rovnice pro λ a μ

$$\lambda_t = \Delta\lambda - \frac{\beta b}{\alpha\xi} \mu \Sigma(z) (z - z^2) \quad \text{na } \Omega \times (0, T), \quad (3.16)$$

$$\mu_t = \frac{1}{\alpha} \Delta\mu + L\lambda_t + \frac{\mu}{\alpha\xi^2} (-6z^2 + 6z - 1) - \mu l(v, z) \quad \text{na } \Omega \times (0, T), \quad (3.17)$$

$$l(v, z) = \frac{\beta b}{\alpha\xi} (v - u_{mt}) \left(\Sigma(z) (1 - 2z) + \Sigma'(z) (z - z^2) \right), \quad (3.18)$$

s počátečními podmínkami

$$\lambda|_{t=0} = 0 \quad \text{na } \Omega, \quad (3.19)$$

$$\mu|_{t=0} = y_f - y|_{t=T} \quad \text{na } \Omega, \quad (3.20)$$

a Dirichletovými okrajovými podmínkami

$$\lambda|_{\partial\Omega} = 0 \quad \text{na } \partial\Omega \times [0, T], \quad (3.21)$$

$$\mu|_{\partial\Omega} = 0 \quad \text{na } \partial\Omega \times [0, T]. \quad (3.22)$$

Pro tuto soustavu jsme zaváděli veličiny $z(t) = y(T-t)$ a $v(t) = u(T-t)$, nicméně při implementaci stále budeme pracovat s veličinami původními, tedy $v_{i,j}^k = u_{i,j}^{N-k-1}$, stejně i pro veličinu z , u té ale použijeme kvůli kompaktnosti zápisu označení $\bar{z} := y_{i,j}^{N-k-1}$, čímž pro $k = 0, 1, \dots, N-2$ dostaneme

$$\begin{aligned} \lambda_{i,j}^{k+1} &= \lambda_{i,j}^k + \tau \frac{\lambda_{i+1,j}^k + \lambda_{i,j+1}^k - 4\lambda_{i,j}^k + \lambda_{i-1,j}^k + \lambda_{i,j-1}^k}{h^2} \\ &\quad - \frac{\tau\beta b}{\alpha\xi} \mu_{i,j}^k \Sigma(\bar{z}) (\bar{z} - \bar{z}^2) \quad \text{na } \omega_h, \end{aligned} \quad (3.23)$$

$$\begin{aligned} \mu_{i,j}^{k+1} &= \mu_{i,j}^k + \tau \frac{\mu_{i+1,j}^k + \mu_{i,j+1}^k - 4\mu_{i,j}^k + \mu_{i-1,j}^k + \mu_{i,j-1}^k}{\alpha h^2} \\ &\quad + L \left(\lambda_{i,j}^{k+1} - \lambda_{i,j}^k \right) + \frac{\tau}{\alpha\xi^2} (-6\bar{z}^2 + 6\bar{z} - 1) \\ &\quad - \frac{\tau\beta b}{\alpha\xi} \mu_{i,j}^k \left(u_{i,j}^{N-k-1} - u_{mt} \right) \left(\Sigma(\bar{z}) (1 - 2\bar{z}) + \Sigma'(\bar{z}) (\bar{z} - \bar{z}^2) \right) \quad \text{na } \omega_h, \end{aligned} \quad (3.24)$$

s počátečním nastavením

$$\lambda_{i,j}^0 = 0 \quad \text{na } \omega_h, \quad (3.25)$$

$$\mu_{i,j}^0 = (y_f)_{i,j} - y_{i,j}^{N-1} \quad \text{na } \omega_h, \quad (3.26)$$

a okrajovými podmínkami

$$\lambda_{i,j}^k = 0 \quad \text{na } \partial\omega_h, \quad (3.27)$$

$$\mu_{i,j}^k = 0 \quad \text{na } \partial\omega_h, \quad (3.28)$$

Gradient \hat{J}

Jako poslední ještě potřebujeme získat přesný předpis pro výpočet gradientu \hat{J} , který má podle (2.62) a (2.74) tvar

$$\hat{J}'(s)[q] = \int_0^T \int_{\partial\Omega} (\gamma s + \nabla\lambda|_{T-t}\vec{n}) q \, dx \, dt, \quad (3.29)$$

kde q je funkce na $\partial\Omega \times [0, T]$. Za q budeme nyní postupně volit funkce, které mají v jednom bodě sítě hodnotu 1 a v ostatních jsou nulové. Tímto způsobem pak získáme složky gradientu \hat{J} v jednotlivých uzlech, které následně můžeme použít pro gradientní sestup. Bodový předpis pro gradient je na každé ze stran obdélníka mírně odlišný, a to kvůli jeho závislosti na normálovém vektoru \vec{n} k $\partial\Omega$. Například na pravém okraji po nahrazení $\nabla\lambda$ pomocí diference získáme

$$(\text{grad}_{\text{right}})_i^k = \gamma s_{i,n-1}^k + \frac{\lambda_{i,n-1}^{N-k-1} - \lambda_{i,n-2}^{N-k-1}}{h}. \quad (3.30)$$

Z (3.27) vidíme, že $\lambda_{i,n-1}^{N-k-1} = 0$, takže se nám výraz zjednoduší na

$$(\text{grad}_{\text{right}})_i^k = \gamma s_{i,n-1}^k - \frac{\lambda_{i,n-2}^{N-k-1}}{h}. \quad (3.31)$$

Technicky vzato by celý výraz měl být ještě vynásobený prostorovým a časovým krokem kvůli tomu, že vystupuje v integrálu. Tyto konstanty ale můžeme zahrnout do velikosti kroku v gradientním sestupu. Obdobným postupem dostaneme i vyjádření pro gradient na zbylých stranách obdélníka, jako

$$(\text{grad}_{\text{left}})_i^k = \gamma s_{i,0}^k - \frac{\lambda_{i,1}^{N-k-1}}{h}, \quad (3.32)$$

$$(\text{grad}_{\text{top}})_j^k = \gamma s_{0,j}^k - \frac{\lambda_{1,j}^{N-k-1}}{h}, \quad (3.33)$$

$$(\text{grad}_{\text{bottom}})_j^k = \gamma s_{n-1,j}^k - \frac{\lambda_{n-2,j}^{N-k-1}}{h}. \quad (3.34)$$

Poznámka 6. Pokud bychom uvažovali parametrický přístup z části 2.2.1, jediná změna by spočívala v záměně $q \rightarrow \frac{\partial s}{\partial p}$ ve vzorci pro gradient. Vzhledem ke způsobu volby \vec{p} nabývá $\frac{\partial s}{\partial p}$ hodnoty 1 právě v jednom bodě sítě, v ostatních je nulová. To přesně odpovídá způsobu volby q , výsledek je tedy stejný pro oba postupy.

3.2 Implementace

Samotný výpočet je implementovaný v jazyce C++, za použití knihovny TNL (Template Numerical Library) [3, 4]. Tato knihovna byla použita zejména kvůli možnosti provádět výpočty na GPU, což by pro náročné úlohy mohlo být výrazně rychlejší. Dále je z této knihovny použitý paralelní for cyklus a výpis výsledků ve formátu VTI. Samotné řešení rovnic pro u a y , respektive λ a μ je díky použití explicitního schématu při diskretizaci z implementačního hlediska relativně jednoduché, jedná se pouze o přepsání vzorců z předchozí části do zdrojového kódu. Celkový postup výpočtu je pak následující:

Algoritmus 1: Postup řešení úlohy.

```
inicializace;  
 $i = 0$ ;  
while  $i < \text{max. počet iterací}$  do  
    vyřešení rovnic (1.6)-(1.11) pro  $u$  a  $y$ , získání počáteční podmínky pro rovnice  
    (2.67)-(2.72);  
    vyřešení rovnic (2.67)-(2.72) pro  $\lambda$  a  $\mu$ ;  
    výpočet gradientu podle (3.29), krok v gradientním sestupu;  
     $i = i + 1$ ;  
end  
výpis výsledků;
```

Zde se na chvíli vrátíme k Poznámce 3, kde jsme diskutovali, o kolik je použití metody adjungované rovnice výpočetně jednodušší, než kdybychom se pokoušeli numericky aproximovat $y'(s)[q]$. Nyní to můžeme říci ještě přesněji, jelikož už máme zavedenou diskretizaci a tudíž víme, na kolika parametrech řízení (okrajová podmínka) závisí. Je jich $2(m+n-2) \cdot N$, což i pro relativně malá rozlišení vychází řádově na statisíce. Tolikrát bychom tedy museli soustavu (1.6)-(1.11) řešit v každé iteraci, zatímco při použití adjungované rovnice řešíme přibližně stejně náročné soustavy pouze dvě.

Při práci s námi použitým modelem potřebujeme ukládat časový průběh u a y , protože vystupují v rovnicích pro λ a μ . To může klást velké nároky na paměť, jelikož kvůli volbě explicitního schématu diskretizace při zvyšování jemnosti sítě velmi rychle roste počet časových hladin, které musíme mít uložené. Z tohoto pohledu by bylo výhodnější používat lineární model (1.2), u kterého by při derivaci v průběhu výpočtu vypadlo u , stačilo by nám tedy ukládat pouze časový vývoj y .

Samotné výpočty pak byly spouštěny na 16-jádrovém procesoru AMD Ryzen 9 590X. Jejich délka se výrazně liší v závislosti na použitém rozlišení a počtu iterací v gradientním sestupu, těch bylo pro nalezení alespoň přibližného řešení u většiny úloh potřeba maximálně 100. Například pro $n = 101$, $m = 61$ a 8000 časových hladin trvá výpočet jedné iterace přibližně 2 sekundy. Při tomto rozlišení je tedy řešení relativně rychlé a tím pádem se hodí k nejrůznějším testování. Pro finální výpočty jsme volili rozlišení dvojnásobné, kde výpočet jedné iterace zabere zhruba 25 s. Pro $n = 201$, $m = 121$ a 32000 časových hladin tedy v závislosti na tom, jak přesné řešení požadujeme, trvá výpočet nižší jednotky hodin.

Kapitola 4

Výpočetní studie

Cílem této části je prozkoumat funkčnost metody adjungované rovnice pro naši úlohu a graficky zobrazit některé výsledky. Mimo to se pokusíme také zjistit vlastnosti úlohy samotné, tedy jakých tvarů krystalu můžeme dosáhnout pomocí řízení pouze okrajových podmínek. Jak již bylo avizováno dříve, tvar krystalu v čase T skutečně nebude stabilní, jeho následujícím vývojem se ale nezabýváme. Nastavení parametrů modelu také pravděpodobně neodpovídá žádné fyzikální úloze, výsledky tedy nelze ztotožnit s reálným experimentem.

4.1 Nastavení parametrů

Parametry modelu fázového pole budou pro všechny výpočty stejné, jejich vlivem na vlastnosti modelu se zde nezabýváme. Nastavení těchto parametrů obsahuje tabulka 4.1.

Parametr	Hodnota	Význam
u_{mt}	1	teplota tání
β	300	koeficient podchlazení
α	3	koeficient připojovací kinetiky
ξ	h	parametr určující tloušťku rozhraní
L	2	latentní teplo
ε_0	0	další parametry modelu
ε_1	0.2	

Tabulka 4.1: Parametry fázového pole.

Volba oblasti Ω a nastavení diskretizace se bude lišit v závislosti na konkrétním příkladě. Některé hodnoty budou ale pro všechny úlohy stejné. Toto nastavení shrnuje tabulka 4.2. Výpočty budeme provádět bez Tichonovovy regularizace, tedy $\gamma = 0$. Její vliv na řešení úlohy nebyl v této práci podrobně zkoumán.

Co se týče nastavení počáteční podmínky pro teplotu, budeme volit vždy jednu z možností $u_0 = 0$ nebo $u_0 = 1$ na Ω . Nulová počáteční podmínka odpovídá rovnoměrnému podchlazení celé oblasti, při volbě $u_0 = 1$ má oblast teplotu shodnou s teplotou tání. V některých případech budeme provádět výpočet dvakrát, pokaždé s jinou volbou u_0 . Podobného rozdílu by bylo možné dosáhnout také volbou různých počátečních profilů y_0 . Z hlediska průběhu řízení například y_0 odpovídající kruhovému krystalu o poloměru $1/5$ při $u_0 = 1$ odpovídá volbě $u_0 = 0$ při zmenšení poloměru na $1/10$.

Parametr	Hodnota	Význam
a	1	délka strany ve směru x
b	různé	délka strany ve směru y
n	různé	počet uzlů ve směru x
m	různé	počet uzlů ve směru y
N	různé	počet časových hladin
h	$1/(n-1)$	prostorový krok
τ	$0.1/h^2$	časový krok

Tabulka 4.2: Nastavení diskretizace.

4.2 Test konvergence

Nejprve prozkoumáme, zda výpočty budou konvergovat k zadanému tvaru lépe při použití jemnější sítě. To by nám mělo poskytnout základní představu o kvalitě našeho modelu. Použijeme k tomu stejnou úlohu jako následně v části 4.4.3, budeme se tedy na čtverci $(0, 1) \times (0, 1)$ snažit dosáhnout vytvoření krystalu obdélníkového tvaru. Výpočet provedeme pro tři různá nastavení, přičemž každé bude mít dvakrát menší prostorový krok než to předchozí. Za velikost chyby budeme považovat normu rozdílu předepsaného profilu a dosaženého výsledku, tedy

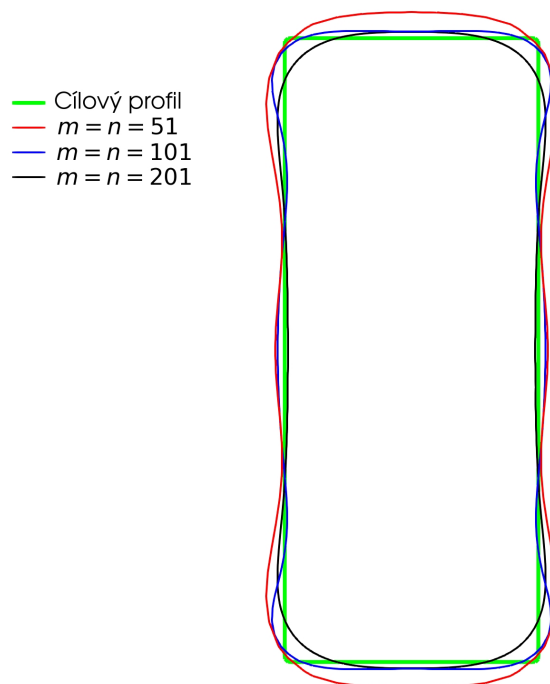
$$\left(\int_{\Omega} (y|_{t=T} - y_f)^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} \approx \left(\sum_{(i,j) \in \omega_h} (y_{i,j}^{N-1} - (y_f)_{i,j})^2 \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Provedením výpočtů dostaneme hodnoty uvedené v Tabulce 4.3.

Rozlišení	Počet časových hladin	Velikost chyby
$n = m = 51$	$N = 1000$	$1.833 \cdot 10^{-3}$
$n = m = 101$	$N = 4000$	$7.323 \cdot 10^{-4}$
$n = m = 201$	$N = 16000$	$3.154 \cdot 10^{-4}$

Tabulka 4.3: Konvergence metody.

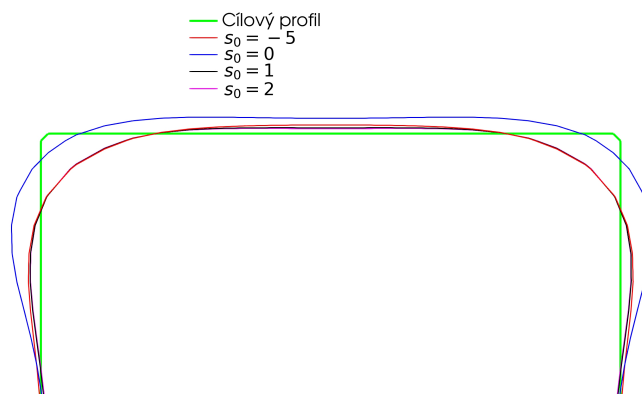
Je tedy vidět, že při zjemňování sítě skutečně dostáváme menší chybu. Z největší části je to ale nejspíše způsobeno tím, že šířka vrstvy, na které dochází k přechodu mezi fázemi je díky volbě parametru $\xi = h$ svázána s prostorovým krokem. Při použití většího rozlišení tedy k přechodu dojde na rychleji a tím pádem můžeme lépe aproximovat zadaný profil, který má skokový přechod. Ten jsme zvolili proto, že nejvíce odpovídá fyzikální předloze, na stejný problém bychom ale narazili i kdybychom volili cílový profil s pozvolným přechodem, který by naopak z tohoto pohledu lépe aproximovaly výpočty s nižším rozlišením. Co se týče samotného konečného tvaru krystalu, je z obrázku 4.1 vidět, že pro vyšší rozlišení dostáváme lepší aproximaci zejména podél stran obdélníka, k ostřejšímu ohybu křivky kolem rohů ale nedochází. To je dáno vlastnostmi úlohy samotné, jelikož díky povaze rovnice vedení tepla se teplotní výkyvy při prostupu oblastí zmenšují a jejich hranice se stává rozmazanější. Vytvoření ostrých rohů ve větší vzdálenosti od krajů se tedy jeví jako nemožné.



Obrázek 4.1: Výsledný tvar krystalu pro různá rozlišení.

4.3 Citlivost na počáteční odhad řešení

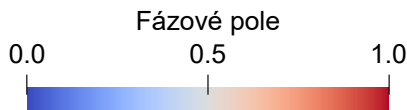
Další věcí, na kterou se podíváme před provedením samotných výpočtů pro konkrétní úlohy, je test citlivosti na počáteční nastavení okrajových podmínek, které budeme značit s_0 . Obecně může jeho různá volba vést k jinému řešení. Naše úloha je z tohoto pohledu relativně stabilní, má to ale svá omezení. Pokud dojde vlivem nastavení s_0 k úplnému rozpuštění krystalu v oblasti, metoda se z hlediska konvergence téměř zastaví, tedy v každé další iteraci je řízení v podstatě stejné jako v té předchozí a nedostaneme žádný rozumný výsledek. Jestliže ale volíme s_0 v okolí teploty tání nebo menší, pro všechny testované úlohy vedly tyto volby k velice podobným výsledkům, v obrázku 4.2 je někdy vizuálně téměř nejde odlišit.



Obrázek 4.2: Výsledný tvar krystalu pro různá s_0 .

4.4 Řešení konkrétních úloh

U všech následujících výpočtů budeme pro zobrazování fázového pole používat stejnou barevnou škálu (obr. 4.3), kde modrá barva značí kapalinu a červená krystal. Na obrázcích bude také černou čarou vyznačena vrstevnice $y = \frac{1}{2}$, tedy pomyslné fázové rozhraní.



Obrázek 4.3: Barevná škála pro fázové pole.

Časový vývoj fázového pole budeme prezentovat pomocí série obrázků se zobrazením tvaru krystalu v různých časech. Tyto časy budeme volit tak, aby co nejlépe ilustrovaly celkový vývoj fázového pole, mohou být tedy pro každou úlohu jiné a nemusí mezi nimi být shodné rozestupy. Pro jejich označení budeme používat číslování $t = 0, 1, \dots, 100$, tedy $t = 0$ odpovídá času 0 a $t = 100$ času T . V obrázku s časem $t = 100$ budeme vykreslovat i cílový profil.

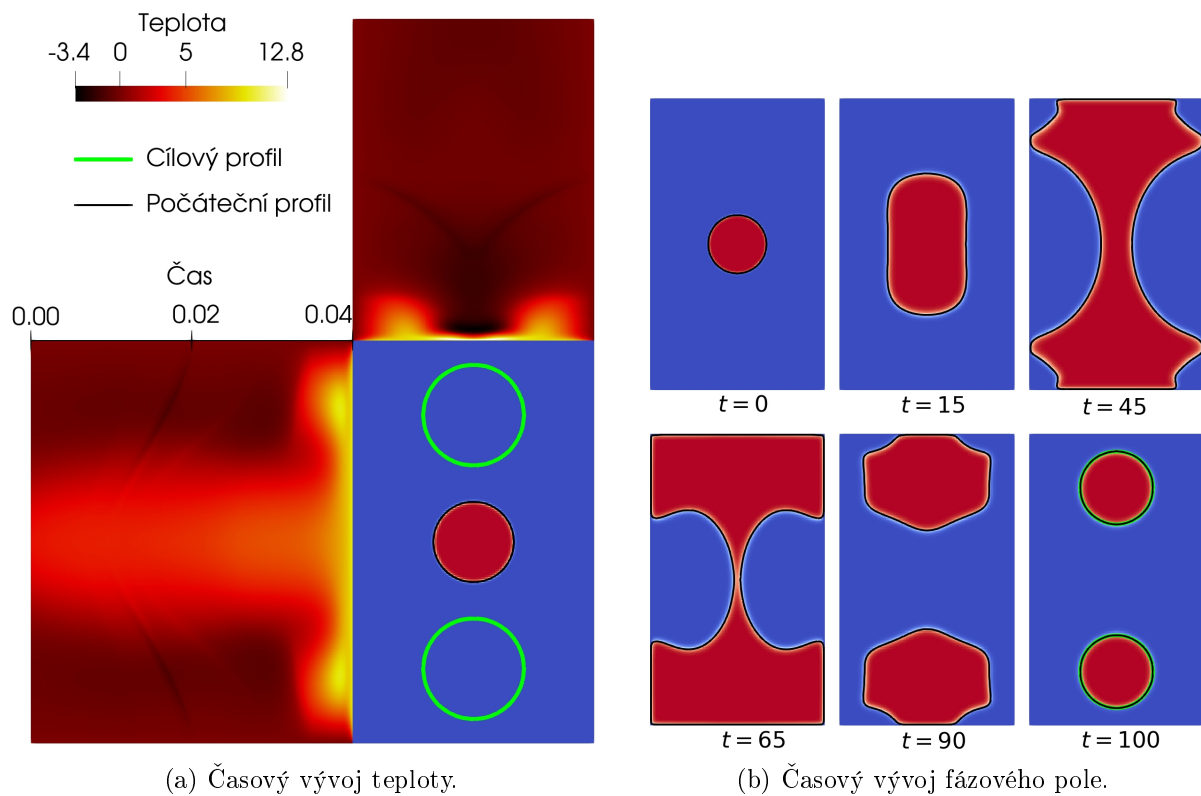
Průběh okrajových podmínek bude zobrazený u příslušných stran obdélníka, přičemž u většiny úloh je řízení na protilehlých stranách symetrické, v těchto případech zobrazíme tedy pouze jednu z nich.

4.4.1 Rozdělení krystalu

Při tomto výpočtu se snažíme dosáhnout rozdělení počátečního krystalu na dva nové. Oblast Ω volíme jako obdélník, což by mělo vzhledem k rozložení počátečního a cílového tvaru krystalu usnadnit řízení. Výpočet provedeme dvakrát, jednou s volbou počáteční podmínky $u_0 = 0$ a podruhé s $u_0 = 1$. Nastavení parametrů výpočtu je v tabulce 4.4.

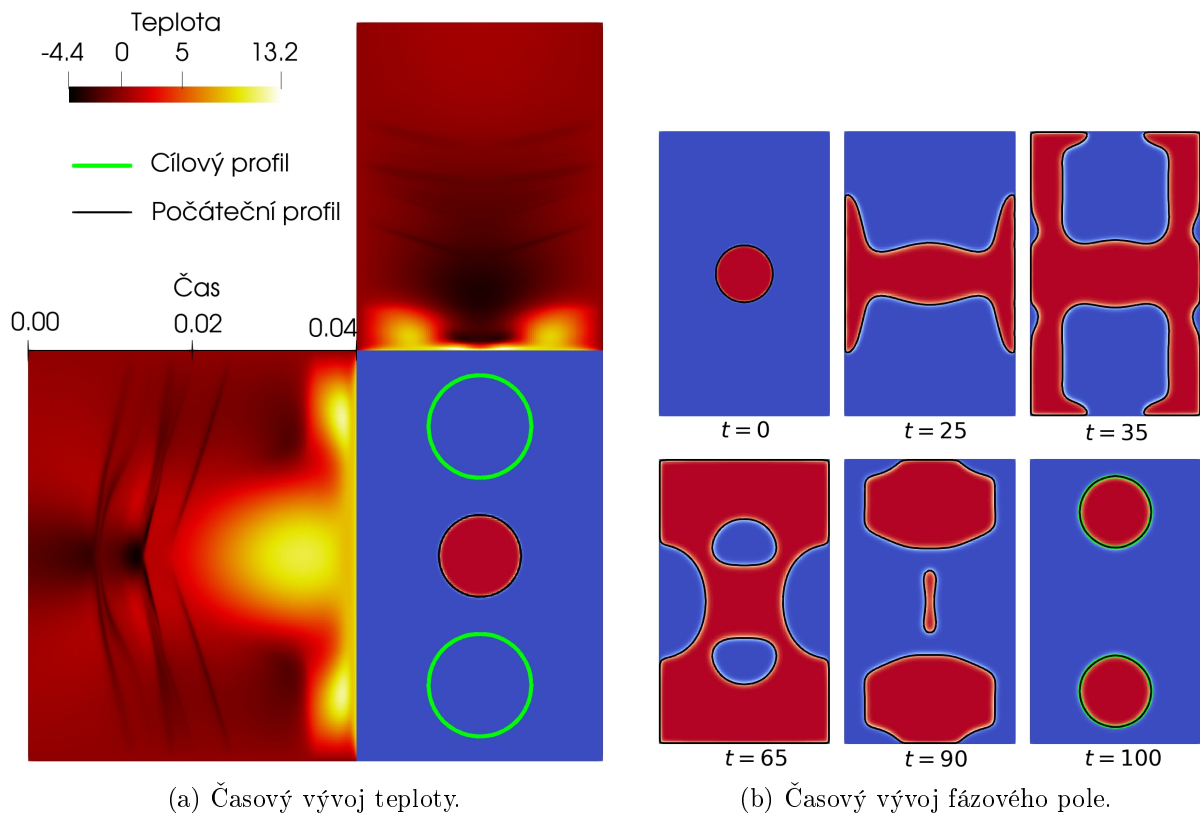
Parametr	Hodnota
Ω	$(0, 1) \times (0, 0.6)$
n	201
m	121
N	32000
u_0	$\{0, 1\}$

Tabulka 4.4: Nastavení parametrů.



Obrázek 4.4: Rozdělení krystalu, $u_0 = 0$.

Při volbě $u_0 = 0$ vidíme (obr. 4.4), že krystal se začne prodlužovat ve svislém směru, načež dojde k rozpuštění jeho středové části a rozdělení na dva nové. V závěru se pak rychlým ohřátím dosáhne konečného tvaru, který v podstatě přesně aproximuje cílový profil.



Obrázek 4.5: Rozdělení krystalu, $u_0 = 1$.

Pro nastavení s $u_0 = 1$ vypadá výsledný průběh odlišně (obr 4.5). Krystal začne růst nejprve ve vodorovném směru. Poté co se dostane až k okrajům, začne se po nich velmi rychle šířit, načež zaplní horní a spodní část oblasti. Následně je průběh obdobný jako v předchozím případě, dojde tedy k rozpuštění středové části krystalu a prudkému zahřátí, čímž dostaneme požadovaný tvar.

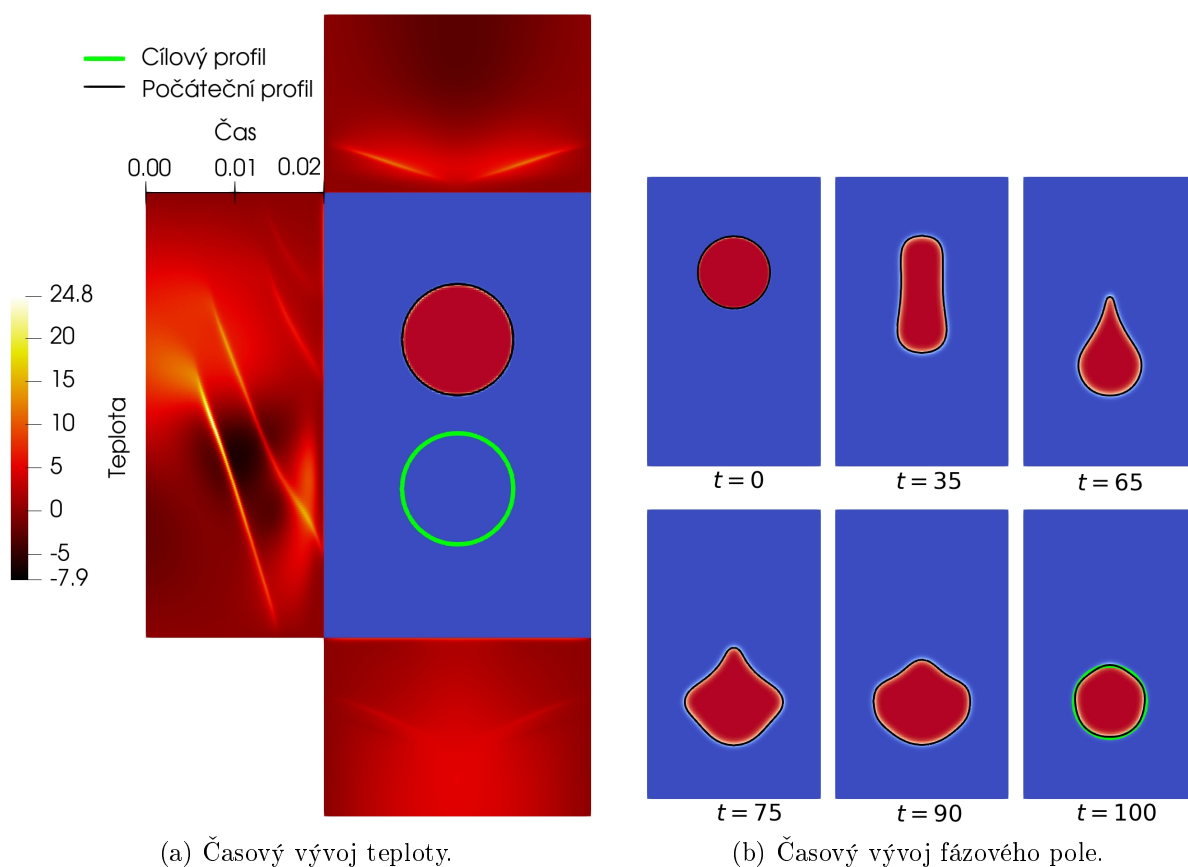
Na tomto příkladě je vidět typická vlastnost metody a to, že pokud zvolíme dostatečně dlouhý čas, probíhá řízené úlohy tak, že nejprve se krystal rozroste až ke krajům oblasti. Na závěr se konečného profilu docílí rychlým zahřátím.

4.4.2 Posunutí krystalu

Tentokrát se pokusíme dosáhnout posunutí kruhového krystalu. Výpočet provedeme na stejné obdélníkové oblasti jako v předchozím příkladě, volíme ale pouze poloviční čas, díky čemuž se krystal v průběhu nerozroste až ke krajům oblasti a získáme zajímavější časový průběh. Nastavení parametrů výpočtu je v tabulce 4.5.

Parametr	Hodnota
Ω	$(0, 1) \times (0, 0.6)$
n	201
m	121
N	16000
u_0	0

Tabulka 4.5: Nastavení parametrů.



Obrázek 4.6: Posunutí krystalu.

U tohoto příkladu je vývoj fázového pole celkem přímočarý (obr. 4.6b), na rozdíl od předchozích případů nedochází k růstu krystalu až ke stranám a následnému rychlému rozpuštění. Možná také důsledkem toho je výsledný krystal mírně odlišný od zadaného tvaru, směrem ke středu oblasti není zcela kruhový, ale má na sobě drobné plošky. Zajímavé také je, že řízení probíhá

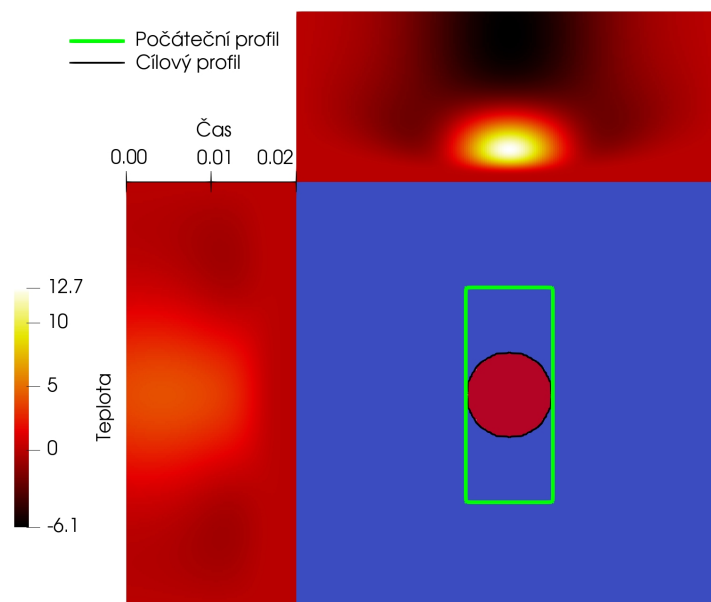
hlavně pomocí regulace teploty na delších stranách obdélníka (obr. 4.6a), a to včetně posouvání krystalu směrem dolů, kdy by bylo logické očekávat, že dojde spíše k výraznému ochlazení spodní strany, které ale nepozorujeme. Z hlediska praktické realizace by takovéto řízení bylo ale nejspíše velmi složité, v průběhu času dochází v podstatě skokově k velkým změnám teploty, což lze vidět v levé okrajové podmínce.

4.4.3 Obdélník

Cílem tohoto výpočtu je zjistit, do jaké míry je možné pomocí řízení okrajových podmínek dosáhnout krystalu s rovnými hranami a ostrými rohy. Oblast výpočtu volíme jako čtverec, cílovým profilem bude obdélník umístěný oproti předchozím úlohám relativně daleko od krajů. Nastavení parametrů výpočtu je v tabulce 4.6.

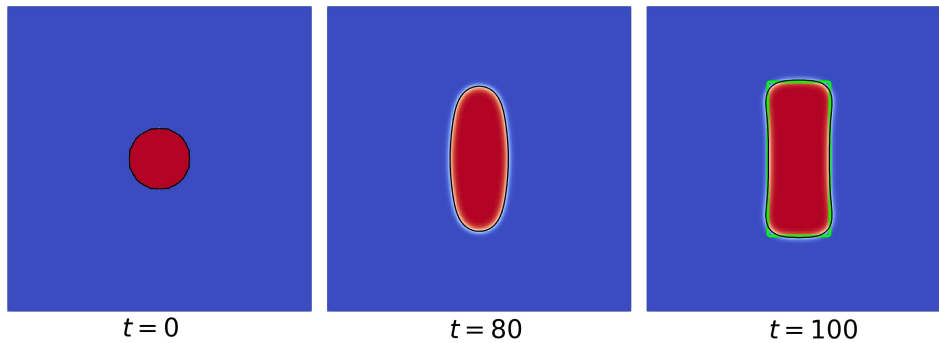
Parametr	Hodnota
Ω	$(0, 1) \times (0, 1)$
n	201
m	201
N	16000
u_0	1

Tabulka 4.6: Nastavení parametrů.



Obrázek 4.7: Časový vývoj teploty.

Na rozdíl od předchozích příkladů je v tomto případě řízení relativně jednoduché a nedochází v něm k tak rychlým teplotním změnám (obr. 4.7).



Obrázek 4.8: Časový vývoj fázového pole.

To se odráží i ve vývoji fázového pole (obr. 4.8), kdy dochází k celkem přímému přechodu mezi počátečním a koncovým stavem. Vidíme, že i na relativně velké vzdálenosti od krajů jsme schopni vytvořit rovné hrany. U rohů obdélníka jsou rozdíly od zadaného tvaru pochopitelně větší.

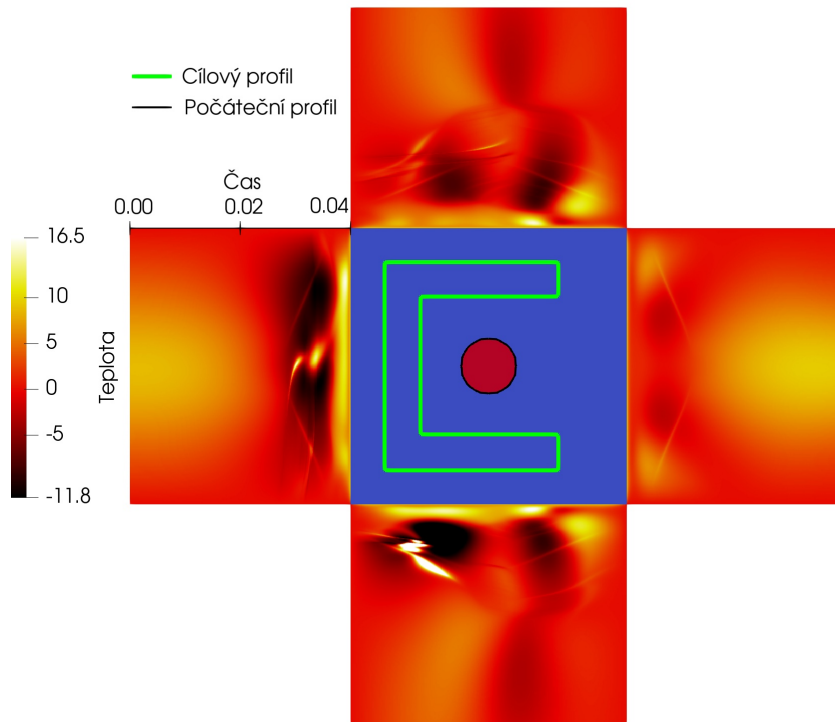
4.4.4 Konkávní tvar

Tentokrát se pokusíme o vytvoření konkávního obrazce vyznačeného na obrázku 4.9. Rádi bychom zjistili, jak si tato metoda poradí zejména s vytvořením rovných vnitřních hran, kde se kvůli jejich pozici zdá řízení velmi složité. Nastavení parametrů výpočtu je v tabulce 4.7.

Parametr	Hodnota
Ω	$(0, 1) \times (0, 1)$
n	201
m	201
N	32000
u_0	0

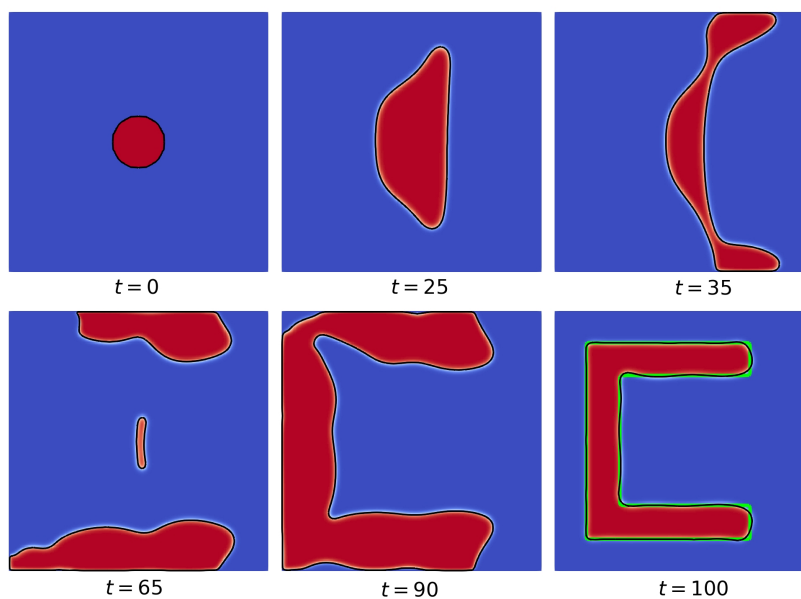
Tabulka 4.7: Nastavení parametrů.

Tentokrát je již z průběhu řízení teploty (obr. 4.9) patrné, že úloha nebude mít na rozdíl od všech předchozích symetrický průběh. To je dáno nejspíše drobnou asymetrií v zadávání cílového profilu. Vidíme také, že opět dochází k velmi rychlým výkyvům teploty, na dolní straně oblasti v jednu chvíli teplota vyskočí až k hodnotě 2000. To znázorňuje na obrázku téměř bílé místo v okrajové podmínce na spodní hraně. Takto vysoká teplota je nejspíše způsobena relativně velkým počtem iterací v gradientním sestupu, kdy s jejich přibývajícím množstvím dochází sice k lepší aproximaci cílového profilu, na druhou stranu se také zvyšují výkyvy v řízení. Pokud bychom tomu chtěli zabránit, museli bychom buď volit menší počet iterací, nebo přidat do výpočtu regularizaci.



Obrázek 4.9: Časový vývoj teploty.

Co se týče vývoje fázového pole (obr. 4.10), vidíme již zmiňovanou asymetrii. Nejprve dojde k roztažení krystalu ve svislém směru a vytvoření oddělených částí u spodní a horní strany. Ty se poté propojí díky velkému podchlazení u levého okraje. Nakonec dojde opět k rychlému zahřátí, díky kterému získá krystal požadovaný tvar. Na rozdíl od příkladu 4.4.3 s obdélníkem vidíme, že tentokrát došlo na vnější straně obrazce k vytvoření velmi ostrých rohů, které mohly vzniknout díky malé vzdálenosti od okraje oblasti, a tím pádem lepší možnosti řízení teploty v potřebném místě. Na vnitřní straně je sice hrana krystalu mírně zvlněná, přesto se jedná o možná až překvapivě dobrý výsledek.



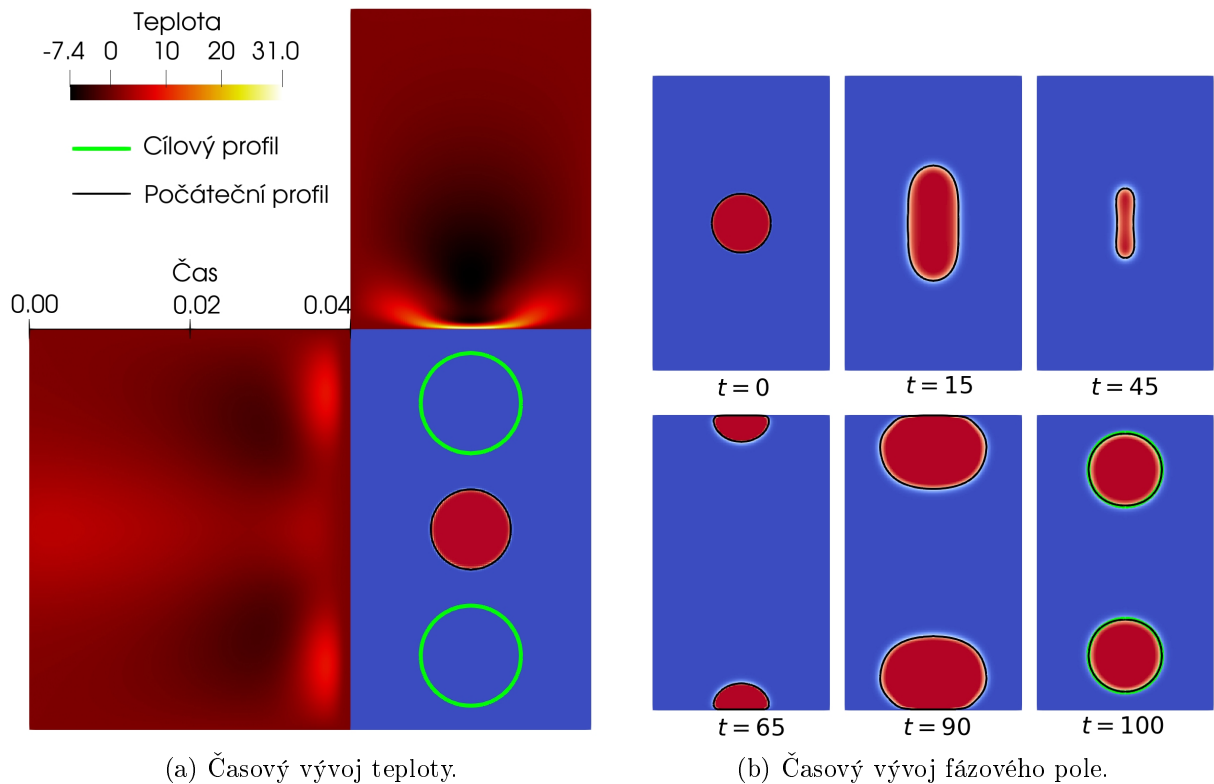
Obrázek 4.10: Časový vývoj fázového pole.

4.4.5 Lineární reakční člen

Na závěr zde také ilustrujeme výpočty s modelem, ve kterém používáme lineární reakční člen 1.2. Jak bylo zmíněno, tento model má správný fyzikální význam pouze pro malá podchlazení, při překročení jisté hranice dochází ke spontánnímu vzniku krystalizačního jádra, kolem kterého se začne formovat nový krystal. Právě kvůli tomuto jevu jsme se rozhodli používat ve zbytku práce jiný model. Nastavení, se kterým provedeme výpočet je stejné jako v příkladě 4.4.1, snažíme se tedy o rozdělení krystalu na dva nové. Nastavení parametrů výpočtu je v tabulce 4.8.

Parametr	Hodnota
Ω	$(0, 1) \times (0, 0.6)$
n	201
m	121
N	32000
u_0	0

Tabulka 4.8: Nastavení parametrů.



Obrázek 4.11: Model s lineárním reakčním členem.

Skutečně vidíme (obr. 4.11), že nejdříve postupně dojde k úplnému rozpuštění počátečního krystalu, načež se díky velkému podchlazení na horní a spodní hraně vytvoří krystaly nové. Ty poté dorostou do požadovaného tvaru.

Závěr

V této práci jsme si nejprve představili optimalizační úlohu týkající se řízení růstu krystalů pomocí okrajových podmínek. Za použití metody fázového pole pro modelování fázových přechodů jsme ji formulovali také matematicky. Následně jsme pro ni odvodili tzv. adjungovanou rovnici, která nám umožnila efektivně hledat gradient účelové funkce při optimalizaci. Samotné numerické řešení jsme provedli pomocí metody konečných diferencí a implementovali v jazyce C++. Dosažené výsledky jsme na závěr prezentovali graficky.

Zjistili jsme, že ve dvourozměrném případě dokážeme s použitým modelem velmi dobře dosáhnout vzniku krystalů základních geometrických tvarů, případně krystal přesunout nebo rozdělit. Přesnost, s jakou jsme schopni dosáhnout zadaného tvaru krystalu je spojena s jeho vzdáleností od okraje oblasti, čím blíže okraji se nachází, tím lépe ho lze docílit. V některých případech dochází v průběhu řízení k velmi rychlým změnám teploty, což by mohlo znamenat problém při případném praktickém využití. Pomoci by s tím mohlo zavedení Tichonovovy regularizace, kterému jsme se zde ale nevěnovali.

Na výsledky této práce lze dále navázat několika způsoby. Jedním z přirozených kroků by bylo rozšíření úlohy do tří dimenzí a ověření funkčnosti metody i pro tuto variantu. Dále by bylo možné se pokusit přidat do modelu fázového pole anizotropii, tedy preferované směry krystalizace. Díky tomu by bylo možné simulovat dendritický růst krystalů, který můžeme běžně pozorovat například při tvorbě sněhových vloček nebo námrazy. Také by bylo vhodné dále prozkoumat vliv regularizace na chování úlohy a s tím související možnost zmenšení teplotních výkyvů.

Bibliografie

- [1] George Bachman a Lawrence Narici. *Functional Analysis*. 2nd ed. Dover Books on Mathematics. Dover Publications, 1998. ISBN: 0486402517.
- [2] Michael Hinze et al. *Optimization with PDE Constraints*. 1. vyd. Mathematical Modelling: Theory and Applications. Springer, 2008. ISBN: 1402088388.
- [3] Jakub Klinkovský et al. „Configurable open-source data structure for distributed conforming unstructured homogeneous meshes with GPU support“. In: *ACM Transactions on Mathematical Software* 48.3 (2022), s. 1–30. DOI: 10.1145/3536164.
- [4] Tomáš Oberhuber, Jakub Klinkovský a Radek Fučík. „TNL: Numerical Library for modern parallel architectures“. In: *Acta Polytechnica* 61.SI (2021), s. 122–134. DOI: 10.14311/ap.2021.61.0122.
- [5] Jan Palán. „Matematické modelování a numerická simulace růstu krystalů metodou fázevého pole“. Bakalářská práce. České vysoké učení technické v Praze, 2021.
- [6] Ingo Steinbach. „Phase-field models in materials science“. In: *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 17.7 (čvc. 2009). DOI: 10.1088/0965-0393/17/7/073001.
- [7] Pavel Strachota, Aleš Wodecki a Michal Beneš. „Focusing the latent heat release in 3D phase field simulations of dendritic crystal growth“. In: *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 29.6 (2021).
- [8] John Strikwerda. *Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations*. 2. vyd. SIAM: Society for Industrial a Applied Mathematics, 2004. ISBN: 0898715679.
- [9] Strauss W.A. *Partial differential equations. An introduction*. 2. vyd. Wiley, 2008. ISBN: 0470054565.
- [10] Eberhard Zeidler. *Nonlinear Functional Analysis and its Applications: I: Fixed-Point Theorems (Nonlinear Functional Analysis & Its Applications) (Pt. 1)*. Springer, 1985. ISBN: 0387909141.