BỘ GIÁO DỤC
VÀ ĐÀO TẠO

VIỆN HÀN LÂM KHOA HỌC
VÀ CÔNG NGHỆ VIỆT NAM

HỌC VIỆN KHOA HỌC VÀ CÔNG NGHỆ

Phạm Hữu Thuần

PHƯƠNG PHÁP PHÂN TÍCH TRỰC GIAO CHUẨN (POD) CHO BÀI TOÁN XÁC ĐỊNH THAM SỐ TRONG PHƯƠNG TRÌNH ELLIPTIC

LUẬN VĂN THẠC SĨ: TOÁN HỌC

Hà Nội – 2022

BỘ GIÁO DỤC
VÀ ĐÀO TẠO

VIỆN HÀN LÂM KHOA HỌC
VÀ CÔNG NGHỆ VIỆT NAM

HỌC VIỆN KHOA HỌC VÀ CÔNG NGHỆ

Phạm Hữu Thuần

PHƯƠNG PHÁP PHÂN TÍCH TRỰC GIAO CHUẨN (POD) CHO BÀI TOÁN XÁC ĐỊNH THAM SỐ TRONG PHƯƠNG TRÌNH ELLIPTIC

Chuyên ngành: Toán ứng dụng
Mã số: 8460112

LUẬN VĂN THẠC SĨ: TOÁN HỌC

NGƯỜI HƯỚNG DẪN KHOA HỌC:

GS.TSKH. Đinh Nho Hào

Hà Nội – 2022

LỜI CAM ĐOAN

Luận văn này được thực hiện dựa trên sự tìm tòi, học hỏi của cá nhân tôi dưới sự hướng dẫn của thầy Đinh Nho Hào. Mọi sự giúp đỡ cho việc thực hiện luận văn này đã được cảm ơn và các thông tin trích dẫn trong luận văn đều được ghi rõ nguồn gốc. Tôi xin chịu trách nhiệm về những lời cam đoan.

Hà Nội, tháng 10 năm 2022

Học viên

Phạm Hữu Thuần

LỜI CẢM ƠN

Đầu tiên, tôi xin gửi lời cảm ơn tới thầy hướng dẫn của tôi GS.TSKH. Đinh Nho Hào, thầy không chỉ giúp đỡ tôi hoàn thành luận văn một cách tốt nhất mà còn luôn quan tâm và chỉ bảo tôi trong cuộc sống.

Tiếp theo tôi xin gửi lời cảm ơn tới quỹ đổi mới sáng tạo (VINIF) đã tài trợ học bổng cho tôi, giúp tôi có thể tập trung hoàn toàn vào việc học tập, nghiên cứu để hoàn thành tốt nhất chương trình thạc sĩ của mình.

Tôi cũng xin cảm ơn trung tâm đào tạo sau đại học Viện Toán học và Học viện Khoa học và Công nghệ, Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam đã tạo ra một môi trường học tập, nghiên cứu tốt nhất trong suốt quá trình tôi học tập cũng như thực hiện luận văn này. Bên cạnh đó tôi xin gửi lời cảm ơn tới anh Nguyễn Xuân Quý, một người bạn cũng như người anh cùng lớp với tôi đã hỗ trợ tôi trong quá trình tìm hiểu cũng như lập trình ví dụ số cho luận văn.

Đặc biệt, tôi xin gửi lời cảm ơn tới gia đình của tôi. Những người đã luôn làm việc chăm chỉ để tôi có thể thực hiện ước mơ của mình. Cảm ơn vì tình yêu thương vô điều kiện của bố, mẹ và tôi tin họ luôn tự hào về hành trình của tôi.

Mục lục

Danh sách hình vẽ

MỞ ĐẦU

Phương pháp phân tích trực giao chuẩn

Phân tích trực giao chuẩn (Proper Othorgonal Decomposition, viết tắt là POD) là một phương pháp số cho phép giảm độ phức tạp của các mô phỏng trên máy tính như động lực học chất lỏng tính toán và phân tích cấu trúc (như mô phỏng va chạm). Điển hình trong phân tích động lực học chất lỏng và tua bin, nó được sử dụng để thay thế các phương trình Navier-Stokes bằng các mô hình đơn giản hơn để giải như trong [1].

Phương pháp phân tích trực giao (POD) có một lịch sử lâu dài. Tiền thân của POD là phương pháp vector riêng do K. Pearson khởi xướng từ năm 1901 để chọn những thành phần chính trong một lượng dữ liệu lớn. Tuy nhiên, phương pháp ảnh tức thời (snapshots) cho POD mới được Sirovich khởi xướng vào năm 1987. Phương pháp này được phát triển cho nhiều bài toán trong các lĩnh vực khác nhau, như xử lý tín hiệu và nhận dạng mẫu, thống kê, thủy động học, khí tượng, kỹ thuật y sinh. . .

Một thời gian dài kể từ năm 1987, phương pháp POD chủ yếu được sử dụng để thực hiện phân tích thành phần chính (PCA) trong tính toán thống kê. Đặc biệt, phương pháp POD Galerkin bắt đầu được áp dụng vào xây dựng mô hình giảm số chiều cho phương trình đạo hàm riêng PDEs và được đề xuất trong công trình xuất sắc năm 2001 và 2002 bởi Kunisch và Volkwein. Từ thời điểm đó trở đi, việc giảm số chiều của các phương pháp tính toán số dựa trên POD cho PDE đã trải qua quá trình phát triển nhanh chóng, cải tiến hiệu suất cho các giải pháp số cho PDE. Phương pháp xây dựng mô hình với bậc nhỏ dựa trên cơ sở POD ngày càng được ứng dụng vào nhiều mô hình trong nhiều lĩnh vực của cuộc sống như y tế, địa chất...

Đối tượng nghiên cứu của luận văn

Trong luận văn này này, chúng tôi áp dụng phương pháp POD cho bài toán ước lượng tham số vô hướng trong phương trình đạo hàm riêng dạng elliptic qua quan sát trên biên.

Trong nhiều ứng dụng, để phù hợp với ý nghĩa vật lý, kĩ thuật tham số cần ước lượng phải thỏa mãn những ràng buộc bất đẳng thức nào đó. Do đó, bài toán ước lượng tham số có thể được xây dựng dưới dạng bài toán điều khiển tối ưu cho một phương trình đạo hàm riêng với ràng buộc bất đẳng thức. Trong luận văn này, chúng tôi tập trung vào thuật toán Lagrange tăng cường, kết hợp với phương pháp SQP toàn cục cho bài toán điều khiển tối ưu này, như trong [2], [3]. Các phương pháp SQP cho các vấn đề ước lượng tham số được nghiên cứu trong [4], [5]. Ràng buộc bất đẳng thức trong bài toán điều khiển tối ưu được xử lý bởi thuật toán Lagrange tăng cường. Ở mỗi bước của phương pháp Lagrange tăng cường, phương pháp SQP toàn cục được sử dụng để giải quyết vấn đề với hạn chế đẳng thức.

Ước lượng tham số thường yêu cầu thực hiện phép lặp nhiều lần mà mỗi lần lặp ta phải giải hai bài toán giá trị biên. Do đó, phương pháp số để giải quyết bài toán khá đắt đỏ. Để khắc phục hạn chế này, chúng tôi áp dụng một mô hình giảm số chiều cho bài toán điều khiển tối ưu để tiết kiệm thời gian tính toán. Phương pháp giảm số chiều cho phương trình elliptic phụ thuộc tham số được thảo luận trong [6], [7]. Trong luận văn này chúng tôi áp dụng phân tích trực giao chuẩn (POD) để thu được mô hình giảm số chiều của bài toán điều khiển tối ưu.

POD là một phương pháp để xấp xỉ các phương trình vi phân bằng các mô hình bậc thấp cho hệ tuyến tính và phi tuyến tính. Nó dựa trên việc chiếu hệ cần giải lên không gian con bao gồm các phần tử cơ sở chứa các đặc điểm (features) của lời giải. Trong luận văn, cơ sở POD bắt nguồn từ các nghiệm cho phương trình PDE cho các giá trị tham số khác nhau (chúng tôi gọi các giải pháp này là 'snapshot').

Bố cục luận văn

Luận văn được viết dựa theo tài liệu [6], [8], [9] và được trình bày theo bố cục:

Chương 1: Giới thiệu về phương pháp POD cho trường hợp rời rạc và liên tục.

Chương 2: Phương pháp POD-Galerkin cho phương trình đạo hàm riêng elliptic và ước lượng sai số của phương pháp POD-Galerkin, ngoài ra trong chương này chúng tôi cũng giới thiệu phương pháp phần tử hữu hạn để tạo ra các snapshot cho phương pháp POD.

Chương 3: Giới thiệu chi tiết về vấn đề ước lượng tham số trong không gian hàm vô hạn chiều. Chúng tôi cũng trình bày cách thuật toán Lagrange tăng cường (bao gồm cả phương pháp SQP) có thể được rời rạc bởi cơ sở Galerkin phần tử hữu hạn hoặc POD.

Chương 0

Một số kiến thức chuẩn bị

0.1 Đại số tuyến tính

Bổ đề 0.1. *(Bất đẳng thức Young) Với mọi* $a, b \in \mathbb{R}$ *và với mọi* $\epsilon > 0$ *ta có:*

$$ab \leq \epsilon a^2 + \frac{b^2}{4\epsilon}.$$

Bổ đề 0.2. *Ma trận đối xứng, xác định dương* $M \in \mathbb{R}^{m\times m}$ *có phân tích giá trị riêng:*

$$M = QDQ^T.$$

Ở đó $D = \operatorname{diag}(\eta_1, \ldots, \eta_m) \in \mathbb{R}^{m\times m}$ *với* $\eta_i > 0$ *với mọi* $i \in \{1, \ldots, m\}$. *Hơn nữa,* $Q \in \mathbb{R}^{m\times m}$ *là ma trận trực giao.*

Định nghĩa 0.3. Với mọi $\alpha \in \mathbb{R}$ ta định nghĩa:

$$M^\alpha = Q \operatorname{diag}(\eta_1^\alpha, \ldots, \eta_m^\alpha)\, Q^T,$$

với ma trận $Q \in \mathbb{R}^{m\times m}$ cũng như các giá trị $\eta_i, i = 1, \ldots, m$, được giới thiệu ở bổ đề trước.

Bổ đề 0.4. *Ta có các tính chất sau:*

$$(M^{\alpha})^{-1} = M^{-\alpha},$$

$$M^{\alpha+\beta} = M^{\alpha}M^{\beta} \text{ với mọi } \alpha, \beta \in \mathbb{R},$$

$$(M^{\alpha})^{T} = M^{\alpha}.$$

Với $\alpha = \frac{1}{2}$*, ta có:*

$$M^{\frac{1}{2}} = Q \operatorname{diag}\left(\sqrt{\eta_1}, \ldots, \sqrt{\eta_m}\right) Q^T.$$

Định nghĩa 0.5. Kí hiệu Kronecker δ_{ik} định nghĩa bởi $\delta_{ik} = 1$ nếu $i = k$ và $\delta_{ik} = 0$ nếu $i \neq k$.

Định nghĩa 0.6. Cho ma trận $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ với $m \geq n$. Phân tích giá trị kì dị (Singular Value Decomposition, viết tắt là SVD) của A là ma trận A được viết dưới dạng:

$$A = U\Sigma V^*,$$

trong đó U và V là hai ma trận trực giao và Σ là ma trận đường chéo. Nếu $U \in \mathbb{C}^{m\times m}$, $V \in \mathbb{C}^{n\times n}$ và $\Sigma \in \mathbb{C}^{m\times n}$ thì $A = U\Sigma V^*$ được gọi là SVD đầy đủ của A. Nếu $U \in \mathbb{C}^{m\times n}$, $V \in \mathbb{C}^{n\times n}$ và $\Sigma \in \mathbb{C}^{n\times n}$ thì $A = U\Sigma V^*$ được gọi là SVD rút gọn của A.

Định lí 0.7. *Mọi ma trận* $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ *đều có SVD. Hơn thế nữa, các giá trị kỳ dị* σ_j *được xác định duy nhất. Nếu* A *là ma trận vuông và các giá trị* σ_j *là khác nhau thì các vector kỳ dị trái và phải* $\{v_j\}, \{u_j\}$ *xác định duy nhất (sai khác nhân tử có module bằng 1).*

0.2 Giải tích hàm

Định nghĩa 0.8. Một họ $\mathcal{M}$ các tập con của $\mathbb{R}^d$ là một σ-đại số nếu:

$$\emptyset, \mathbb{R}^d \in \mathcal{M},$$

$$A \in \mathcal{M} \text{ suy ra } \left(\mathbb{R}^d - A\right) \in \mathcal{M},$$

$$\text{nếu } \{A_k\}_{k=1}^{\infty} \subset \mathcal{M}, \text{ khi đó } \bigcup_{k=1}^{\infty} A_k, \bigcap_{k=1}^{\infty} A_k \in \mathcal{M}.$$

Định nghĩa 0.9. Với $f : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$. Ta gọi f là hàm đo được nếu:

$$f^{-1}(U) \in \mathcal{M},$$

với mỗi tập mở $U \subset \mathbb{R}$.

Định nghĩa 0.10. Toán tử liên hợp $\mathcal{A}^* : H \to V$ của toán tử tuyến tính, bị chặn $\mathcal{A} : V \to H$ được định nghĩa bởi:

$$\langle \mathcal{A}u, v\rangle_H = \langle u, \mathcal{A}^* v\rangle_V ,$$

với mọi $u \in V$ và $v \in H$.

Bổ đề 0.11. *(Bất đẳng thức Cauchy-Schwarz) Cho V là không gian Hilbert. Khi đó:*

$$\langle u, v\rangle_V \leq \|u\|_V \|v\|_V,$$

với mọi $u, v \in V$.

Định nghĩa 0.12. Với $\mathcal{B}_1, \mathcal{B}_2$ là hai không gian Banach thực. Toán tử $\mathcal{T} : \mathcal{B}_1 \to \mathcal{B}_2$ được gọi là toán tử tuyến tính, bị chặn nếu các điều kiện sau thỏa mãn:

1) $\mathcal{T}(\alpha u + \beta v) = \alpha \mathcal{T} u + \beta \mathcal{T} v$, với mọi $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ và $u, v \in \mathcal{B}_1$.

2) Tồn tại hằng số $c > 0$ sao cho $\|\mathcal{T}_u\|_{\mathcal{B}_2} \leq c\|u\|_{\mathcal{B}_1}$, với mọi $u \in \mathcal{B}_1$.

Tập tất cả các toán tử tuyến tính, bị chặn từ $\mathcal{B}_1$ vào $\mathcal{B}_2$ được kí hiệu là $\mathcal{L}(\mathcal{B}_1, \mathcal{B}_2)$, là không gian Banach với chuẩn:

$$\|\mathcal{T}\|_{\mathcal{L}(\mathcal{B}_1,\mathcal{B}_2)} = \sup_{\|u\|_{\mathcal{B}_1}=1} \|\mathcal{T}u\|_{\mathcal{B}_2}, \text{ với } \mathcal{T} \in \mathcal{L}(\mathcal{B}_1, \mathcal{B}_2).$$

Nếu $\mathcal{B}_1 = \mathcal{B}_2$, ta có thể viết đơn giản $\mathcal{L}(\mathcal{B}_1)$. Toán tử liên hợp $\mathcal{T}' : \mathcal{B}_2' \to \mathcal{B}_1'$ của toán tử $\mathcal{T}$ được định nghĩa bởi:

$$\left\langle \mathcal{T}'f, u \right\rangle_{\mathcal{B}_1',\mathcal{B}_1} = \left\langle f, \mathcal{T}u \right\rangle_{\mathcal{B}_2',\mathcal{B}_2},$$

với mọi $(u, f) \in \mathcal{B}_1 \times \mathcal{B}_2'$. Ở đó $\langle . \rangle_{\mathcal{B}_1',\mathcal{B}_1}$ là cặp liên hợp của không gian $\mathcal{B}_1$ với không gian đối ngẫu của nó $\mathcal{B}_1' = \mathcal{L}(\mathcal{B}_1, \mathbb{R})$.

Với $\mathcal{H}_1$, $\mathcal{H}_2$ là hai không gian Hilbert thực. Với $\mathcal{T} \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$, toán tử liên hợp $\mathcal{T}^\star : \mathcal{H}_2 \to \mathcal{H}_1$ là duy nhất và định nghĩa bởi:

$$\left\langle \mathcal{T}^\star v, u \right\rangle_{\mathcal{H}_1} = \left\langle v, \mathcal{T}u \right\rangle_{\mathcal{H}_2} = \left\langle \mathcal{T}u, v \right\rangle_{\mathcal{H}_2},$$

với mọi $(u, v) \in \mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2$. Với $\mathcal{J}_i : \mathcal{H}_i \to \mathcal{H}_i'$ với $i = 1, 2$, là kí hiệu của đẳng cấu Riesz thỏa mãn:

$$\left\langle u, v \right\rangle_{\mathcal{H}_i} = \left\langle \mathcal{J}_i u, v \right\rangle_{\mathcal{H}_i',\mathcal{H}_i},$$

với mọi $v \in \mathcal{H}_i$.

Khi đó ta có biểu diễn $\mathcal{T}^\star = \mathcal{J}_1^{-1}\mathcal{T}'\mathcal{J}_2$. Hơn nữa $(\mathcal{T}^\star)^\star = \mathcal{T}$ với mọi $\mathcal{T} \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$. Nếu $\mathcal{T}^\star = \mathcal{T}$ ta nói $\mathcal{T}$ tự liên hợp. Toán tử $\mathcal{T} \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$ được gọi là không âm nếu $\left\langle \mathcal{T}u, u \right\rangle_{\mathcal{H}_2} \geq 0$, với mọi $u \in \mathcal{H}_1$. Cuối cùng $\mathcal{T} \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$ được gọi là compact nếu mọi dãy bị chặn $\{u_n\}_{n\in\mathbb{N}} \subset \mathcal{H}_1$ dãy $\{\mathcal{T}u_n\}_{n\in\mathbb{N}} \subset \mathcal{H}_2$ chứa một dãy con hội tụ.

Định nghĩa 0.13. Với $\mathcal{H}$ là không gian Hilbert thực và $\mathcal{T} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$.

1) Một số phức λ thuộc tập chính quy $\rho(\mathcal{T})$ nếu $\lambda\mathcal{I} - \mathcal{T}$ là song ánh với toán tử ngược bị chặn. Ở đây $\mathcal{I} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ là kí hiệu của toán tử đơn vị. Nếu $\lambda \notin \rho(\mathcal{T})$, khi đó λ thuộc tập phổ $\sigma(\mathcal{T})$ của $\mathcal{T}$.

2) Với $u \neq 0$ là vectơ với $\mathcal{T}u = \lambda u$ với $\lambda \in \mathbb{C}$. Khi đó u được gọi là vectơ riêng của $\mathcal{T}$ và λ là giá trị riêng tương ứng. Nếu λ là giá trị riêng, khi đó $\lambda\mathcal{I} - \mathcal{T}$ không phải là đơn ánh. Do đó $\lambda \in \sigma(\mathcal{T})$.

Định lí 0.14. *(Riesz Schauder) Với $\mathcal{H}$ là không gian Hilbert thực và $\mathcal{T} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ là toán tử tuyến tính, compact. Khi đó tập phổ $\sigma(\mathcal{T})$ là tập rời rạc và không có điểm giới hạn ngoại trừ (có thể) là điểm 0. Hơn nữa, không gian vectơ riêng tương ứng với mỗi giá trị khác 0 của $\lambda \in \sigma(\mathcal{T})$ là hữu hạn chiều.*

Định lí 0.15. *(Hilbert-Schmidt) Với $\mathcal{H}$ là không gian Hilbert thực và $\mathcal{T} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ là toán tử tuyến tính, compact, tự liên hợp. Khi đó, tồn tại dãy giá trị riêng $\{\lambda_i\}_i \in \mathcal{J}$ và hệ cơ sở trực chuẩn đầy đủ tương ứng $\{\psi_i\}_{i\in\mathcal{J}} \subset \mathcal{H}$ thỏa mãn:*

$$\mathcal{T}\psi_i = \lambda_i\psi_i, \text{ và } \lambda_i \to 0 \text{ với } i \to \infty.$$

0.3 Phương trình đạo hàm riêng

Định nghĩa 0.16. Cho $\Omega \subset \mathbb{R}^n$. Với $1 \leq p < \infty$ ta định nghĩa không gian $L^p(\Omega)$ là không gian các hàm đo được trên Ω thỏa mãn:

$$\left(\int_\Omega |f(x)|^p \mathrm{d}x\right)^{\frac{1}{p}} < \infty.$$

và chuẩn trên nó:

$$\|f\|_{L^p(\Omega)} = \left(\int_\Omega |f(x)|^p \mathrm{d}x\right)^{\frac{1}{p}}.$$

Đặc biệt với $p = 2$ ta được $L^2(\Omega)$ là không gian Hilbert.

Định nghĩa 0.17. Với Ω định nghĩa ở trên, ta định nghĩa không gian các hàm khả tích địa phương bởi:

$$L^1_{loc}(\Omega) = \{f : \Omega \to \mathbb{R} \text{ đo được } |f|_K \in L^1(K)\ \forall K \subset \Omega,\ K \text{ compact}\}.$$

Định nghĩa 0.18. (Đạo hàm yếu) Giả sử $u, v \in L^1_{loc}(\Omega)$ và $\alpha = (\alpha_1, ..., \alpha_n)$ là đa chỉ số với bậc $|\alpha| = \alpha_1 + ... + \alpha_n$. Ta nói v là đạo hàm yếu cấp α của u và ký hiệu:

$$D^\alpha u = v,$$

với $D^\alpha u = \dfrac{\partial^{\alpha_1}}{\partial x_1^{\alpha_1}} ... \dfrac{\partial^{\alpha_n}}{\partial x_n^{\alpha_n}} u$. Nếu:

$$\int_\Omega u D^\alpha \phi \mathrm{d}x = (-1)^{|\alpha|} \int_\Omega v \phi \mathrm{d}x,$$

với mọi hàm thử $\phi \in C_c^\infty(\Omega)$, với $C_c^\infty(\Omega)$ là không gian các hàm khả vi vô hạn lần và có giá compact trên Ω.

Định nghĩa 0.19. (Không gian Sobolev) Với $1 \leq p < \infty$ và $k \in \mathbb{N}$. Ta kí hiệu $W^{k,p}(\Omega)$ là không gian tuyến tính của các hàm $y \in L^p(\Omega)$ có đạo hàm yếu $D^\alpha y \in L^p(\Omega)$ với mọi đa chỉ số α với bậc $|\alpha| \leq k$, cùng với chuẩn tương ứng:

$$\|y\|_{W^{k,p}(\Omega)} = \left(\sum_{|\alpha| \leq k} \int_\Omega |D^\alpha y|^p \mathrm{d}x \right)^{\frac{1}{p}}.$$

Không gian $W^{k,p}(\Omega)$ là không gian Banach, được gọi là không gian Sobolev

Ta thường quan tâm đến trường hợp cụ thể $p = 2$, ta kí hiệu:

$$H^k(\Omega) = W^{k,2}(\Omega).$$

Đặc biệt ta quan tâm đến không gian $H^1(\Omega)$ mà ta sẽ sử dụng trong luận văn này. Ta có:

$$H^1(\Omega) = \{y \in L^2(\Omega) : D_{x_i} y \in L^2(\Omega), i = 1, ..., N\}.$$

Với tích vô hướng:

$$\langle u, v \rangle_{H^1(\Omega)} = \int_\Omega uv \mathrm{d}x + \int_\Omega \nabla u . \nabla v \mathrm{d}x,$$

với $\nabla u = (D_{x_1} u, ..., D_{x_n} u)$. Và chuẩn tương ứng:

$$\|y\|_{H^1(\Omega)} = \left(\int_\Omega (y^2 + |\nabla y|^2) \mathrm{d}x \right)^{\frac{1}{2}},$$

với $|\nabla y|^2 = (D_{x_1} y)^2 + ... + (D_{x_n} y)^2$.

Bổ đề 0.20. *(Định lí vết) Giả sử Ω bị chặn $\Gamma = \partial\Omega$ thuộc lớp C^1. Khi đó tồn tại toán tử tuyến tính bị chặn:*

$$\tau_\Gamma : H^1(\Omega) \to L^2(\Gamma),$$

thỏa mãn:

$$\tau_\Gamma u = u|_\Gamma ,$$

và:

$$\|\tau_\Gamma u\|_{L^2(\Gamma)} \leq C_\Gamma \|u\|_{H^1(\Omega)},$$

với $u \in H^1(\Omega)$, với hằng số $C_\Gamma > 0$, được gọi là hằng số vết, phụ thuộc vào miền Ω.

Định nghĩa 0.21. Mọi ánh xạ từ $[a, b] \in \mathbb{R}$ vào không gian Banach X được gọi là hàm giá trị vectơ.

Phụ thuộc vào không gian X, ta có một số trường hợp đặc biệt:

- $X = \mathbb{R}$. Khi đó hàm giá trị vectơ $y : [a, b] \to \mathbb{R}$ là hàm giá trị thực một biến.

- $X = \mathbb{R}^N$. Khi đó $y : [a, b] \to \mathbb{R}^N$ với mỗi giá trị của biến t là một vectơ: $y(t) = [y_1(t), ..., y_N(t)]^\top \in \mathbb{R}^N$.

- $X = H^1(\Omega)$. Khi đó với mỗi $t \in [a, b]$, giá trị $y(t)$ của hàm số $y : [a, b] \to H^1(\Omega)$ là một phần tử của $H^1(\Omega)$, và do đó nó chính là một hàm trên biến không gian $x \in \Omega$. Nói cách khác, $y(t) = y(., t) \in H^1(\Omega)$ với mỗi $t \in [a, b]$, nghĩa là hàm $x \to y(x, t)$ thuộc $H^1(\Omega)$.

Định nghĩa 0.22. Cho $\{X, \|.\|_X\}$ là không gian Banach. Ta nói hàm giá trị vectơ $y : [a, b] \to X$ là liên tục tại $t \in [a, b]$ nếu ta có $\lim\limits_{\tau \to t} \|y(\tau) - y(t)\|_X = 0$. Ta kí hiệu không gian các hàm giá trị vectơ liên tục tại mọi $t \in [a, b]$ bởi $C([a, b], X]$. Không gian $C([a, b], X])$ là không gian Banach với chuẩn tương ứng:

$$\|y\|_{C([a,b],X])} = \max_{t \in [a,b]} \|y(t)\|_X.$$

Định nghĩa 0.23. Một hàm giá trị vectơ $y : [a, b] \to X$ được gọi là hàm bước nếu tồn tại hữu hạn $y_i \in X$, và các tập đo được Lebesgue, đôi một rời nhau $M_i \in [a, b]$ với $1 \le i \le m$, thỏa mãn $[a, b] = \cup_{i=1}^m M_i$ và $y(t) = y_i$ với mọi $t \in M_i, 1 \le i \le m$.

Định nghĩa 0.24. Một hàm giá trị vectơ $y : [a, b] \to X$ được gọi là đo được nếu tồn tại dãy các hàm bước $\{y_k\}_{k=1}^\infty$ sao cho $y(t) = \lim\limits_{k \to \infty} y_k(t)$ hầu khắp nơi $t \in [a, b]$.

Bây giờ ta giới thiệu không gian L^p của hàm giá trị vectơ:

Định nghĩa 0.25. (i) Ta kí hiệu $L^p(a, b; X)$ với $1 \le p < \infty$, là không gian tuyến tính của tất cả các hàm giá trị vectơ đo được $y : [a, b] \to X$ với tính chất:

$$\int_a^b \|y(t)\|_X^p \mathrm{d}t < \infty.$$

$L^p(a, b; X)$ là không gian Banach với chuẩn tương ứng:

$$\|y\|_{L^p(a,b;X)} := \left(\int_a^b \|y(t)\|_X^p \mathrm{d}t \right)^{\frac{1}{p}}.$$

(ii) Ta kí hiệu $L^\infty(a, b; X)$ là không gian Banach tất cả các hàm giá trị vectơ đo được $y : [a, b] \to X$ với tính chất:

$$\|y\|_{L^\infty(a,b;X)} := \operatorname{ess\,sup}_{[a,b]} \|y(t)\|_X < \infty.$$

Trong không gian đã định nghĩa, các hàm khác nhau trên một tập con của $[a, b]$ có độ đo Lebesgue là 0 thuộc cùng một lớp tương đương và được coi là bằng nhau. Dễ thấy $C([a, b], X) \subset L^p(a, b; X) \subset L^q(a, b; X)$ với $1 \leq p \leq q \leq \infty$.

Trong không gian $L^1(a, b; X)$, và do đó cũng trong không gian $L^p(a, b; X)$ với $1 \leq p \leq \infty$ và $C([a, b], X)$, tích phân Bochner có thể định nghĩa cho hàm giá trị vectơ. Với hàm bước y ta định nghĩa như sau:

$$\int_a^b y(t)\mathrm{d}t := \sum_{i=1}^m y_i |M_i|,$$

với $y_i \in X$ là giá trị của y trên M_i và $|M_i|$ là kí hiệu độ đo Lebesgue của tập M_i với $1 \leq i \leq m$. Rõ ràng tích phân này là một phần tử của X. Với $y \in L^1(a, b; X)$, vì y đo được nên tồn tại dãy $\{y_k\}_{k=1}^\infty$ các hàm bước hội tụ hầu khắp nơi trên $[a, b]$ đến y. Khi đó tích phân Bochner của y được định nghĩa như sau:

Định nghĩa 0.26. (i) Ta gọi hàm đo được $y : [a, b] \to X$ là khả tích nếu tồn tại dãy các hàm bước $\{y_k\}_{k=1}^{\infty}$ thỏa mãn:

$$\int_a^b \|y_k(t) - y(t)\|_X \mathrm{d}t \to 0, \text{ với } k \to \infty.$$

(ii) Nếu y khả tích, ta định nghĩa:

$$\int_a^b y(t)\mathrm{d}t = \lim_{k\to\infty} \int_a^b y_k(t)\mathrm{d}t.$$

Định lí 0.27. *(Bochner, [10] chương 5) Một hàm đo được $y : [a, b] \to X$ là khả tích khi và chỉ khi $t \to \|y(t)\|_X$ là khả tích. Trong trường hợp này:*

$$\left\| \int_a^b y(t)\mathrm{d}t \right\| \leq \int_a^b \|y(t)\|\mathrm{d}t,$$

và:

$$\left\langle u^\star, \int_a^b y(t)\mathrm{d}t \right\rangle = \int_a^b \left\langle u^\star, y(t) \right\rangle \mathrm{d}t,$$

với $u^\star \in X'$ là không gian đối ngẫu của X.

Định nghĩa 0.28. Với $u \in L^1(a, b; X)$. Ta gọi $v \in L^1(a, b; X)$ là đạo hàm yếu của u và viết:

$$u' = v,$$

nếu:

$$\int_a^b \phi'(t)u(t)\mathrm{d}t = -\int_a^b \phi(t)v(t)\mathrm{d}t,$$

với mọi hàm thử vô hướng $\phi \in C_c^\infty(a, b)$.

Định nghĩa 0.29. (i) Không gian Sobolev $W^{1,p}(a, b; X)$ chứa tất cả các hàm $u \in L^p(a, b; X)$ sao cho u' tồn tại theo nghĩa yếu và thuộc $L^p(a, b; X)$. Hơn nữa:

$$\|u\|_{W^{1,p}(a,b;X)} = \left(\int_a^b \|u(t)\|_X^p + \|u'(t)\|_X^p \mathrm{d}t \right)^{\frac{1}{p}}, \text{ với } 1 \leq p < \infty.$$

Với $p = \infty$, ta có: $\|u\|_{W^{1,p}(a,b;X)} = \operatorname{ess\,sup}_{[a,b]}(\|u(t)\|_X + \|u'(t)\|_X)$.

(ii) Ta kí hiệu $H^1(a, b; X) = W^{1,2}(a, b; X)$.

0.4 Lí thuyết tối ưu

Xét bài toán tối ưu hữu hạn chiều dạng:

$$\min J(x) \text{ với } x \in \mathbb{R}^n \text{ s.t } e(x) = 0 \in \mathbb{R}^m, \tag{P}$$

Với $e : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$. Một nghiệm của (P) được gọi là một nghiệm tối ưu của bài toán tối ưu.

Định nghĩa 0.30. (Tập điểm chấp nhận được) Tập điểm chấp nhận được được cho bởi:

$$\mathcal{F} = \left\{x \in \mathbb{R}^n : e(x) = 0\right\}.$$

Định nghĩa 0.31. (Đạo hàm riêng) Cho $x \in X^n$ và $y \in Y^m$ với $n, m \in \mathbb{N}$. Khi đó $\nabla_x J(x, y)$ là kí hiệu của vectơ chứa $\frac{\partial J(x,y)}{\partial x_i}$ với $1 \leq i \leq n$.

Định nghĩa 0.32. (Ma trận Hessian) Ma trận chứa các đạo hàm riêng cấp hai của $J : X^n \to \mathbb{R}$ chứa $\frac{\partial^2 J(x)}{\partial x_i \partial x_j}$ tại $\left(\nabla^2 J(x)\right)_{ij}$ với $1 \leq i, j \leq n$, được gọi là ma trận Hessian và kí hiệu là $\nabla^2 J(x)$. Nếu $x \in X^n$ và $y \in Y^m$ với $n, m \in \mathbb{N}$, ma trận $\nabla^2_{xx} J(x, y)$ chứa các thành phần $\frac{\partial^2 J(x,y)}{\partial x_i \partial x_j}$ với $1 \leq i, j \leq n$.

Định nghĩa 0.33. (Điểm chính quy) Điểm $x^* \in \mathcal{F}$ là điểm chính quy nếu gradient (yếu) (đã định nghĩa ở phần trước) $\nabla e_1(x^*), \ldots, \nabla e_m(x^*)$ là độc lập tuyến tính. Do đó, x^* là chính quy nếu:

$$\nabla e\left(x^*\right)=\begin{pmatrix}\nabla e_1\left(x^*\right)^T\\ \vdots\\ \nabla e_m\left(x^*\right)^T\end{pmatrix},$$

là toàn ánh.

Định nghĩa 0.34. (Nghiệm địa phương) Điểm $x^* \in \mathcal{F}$ là nghiệm địa phương (chặt) của (P) khi và chỉ khi:

$$J(x) \geq J\left(x^*\right) \quad \big(J(x) > J\left(x^*\right)\big)\text{, với mọi } x \in (U \cap \mathcal{F}) \setminus \left\{x^*\right\},$$

với U là lân cận của x^*.

Định lí 0.35. *(Điều kiện cần tối ưu bậc nhất) Giả sử $x^* \in \mathbb{R}^n$ là một nghiệm địa phương của (P) và x^* là chính quy. Khi đó tồn tại duy nhất vectơ nhân tử Lagrange $\lambda^* = \left(\lambda_1^*, \ldots, \lambda_m^*\right)^T$ thỏa mãn điều kiện tối ưu bậc nhất (điều kiện KKT):*

$$\nabla J\left(x^*\right) + \nabla e\left(x^*\right)^T \lambda^* = 0 \in \mathbb{R}^n,$$

và:

$$e\left(x^*\right) = 0 \in \mathbb{R}^m.$$

Hàm Lagrange $\mathcal{L} : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$ định nghĩa bởi:

$$\mathcal{L}(x, \lambda) = J(x) + e(x)^T \lambda = J(x) + \langle e(x), \lambda\rangle_{\mathbb{R}^m} \text{ với } (x, \lambda) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m,$$

Điều kiện tối ưu bậc nhất của (P) có thể viết như sau:

$$\nabla_x \mathcal{L}\left(x^*, \lambda^*\right) = 0 \text{ và } \nabla_\lambda \mathcal{L}\left(x^*, \lambda^*\right) = 0.$$

Định lí 0.36. *(Điều kiện đủ tối ưu bậc hai) Giả sử* $x^* \in \mathcal{F}$ *là điểm chính quy và* x^* *cùng với* $\lambda^* \in \mathbb{R}^m$ *thỏa mãn:*

$$\nabla J\left(x^*\right) + \nabla e\left(x^*\right)^T \lambda^* = 0 \in \mathbb{R}^n,$$

và:

$$e\left(x^*\right) = 0 \in \mathbb{R}^m.$$

Hơn nữa, ma trận:

$$\begin{aligned}\nabla_{xx}\mathcal{L}\left(x^*, \lambda^*\right) &= \nabla_{xx}J\left(x^*, \lambda^*\right) + \nabla_{xx}e\left(x^*\right)^T \lambda^* \\ &= \nabla_{xx}J\left(x^*, \lambda^*\right) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i^* \nabla_{xx}e_i\left(x^*\right),\end{aligned}$$

xác định dương trên $\operatorname{Ker}\left(\nabla e\left(x^*\right)\right)$*, nghĩa là,* $v^T \nabla_{xx}\mathcal{L}\left(x^*, \lambda^*\right) v > 0$ *với mọi* $v \in \mathbb{R}^n$ *thỏa mãn* $\nabla e\left(x^*\right) v = 0$*. Khi đó* x^* *là nghiệm địa phương chặt của (P).*

Chương 1

PHƯƠNG PHÁP POD

Cho X là không gian Hilbert thực với tích vô hướng tương ứng $\langle .,. \rangle_X$ và chuẩn sinh bởi tích vô hướng $||.||_X = \langle .,. \rangle_X^{1/2}$. Hơn nữa ta giả sử X khả li từ đó suy ra X có hệ cơ sở trực chuẩn đếm được. Để áp dụng được phương pháp POD ta cần có các phần tử (dữ liệu) trong không gian mà ta muốn giảm số chiều (gọi là các snapshot) để thực hiện việc tìm cơ sở POD.

1.1 Trường hợp rời rạc

Với $n, \wp \in N$ giả sử ta có các *snapshot* $y_1^k, ..., y_\wp^k \in X$ với ít nhất một phần tử khác 0. Ta xét không gian con tuyến tính, hữu hạn chiều:

$$V^n = \text{span}\{y_j^k | 1 \leq j \leq n; 1 \leq k \leq \wp\} \subset X,$$

với số chiều $d^n \in \{1, ..., n\wp\} < \infty$. Ta gọi V^n là không gian con snapshot.

Với hệ cơ sở trực chuẩn đầy đủ $\{\psi_i\}_{i \in \mathcal{J}} \in X$ ta có biểu diễn:

$$y_j^k = \sum_{i \in \mathcal{J}} \left\langle y_j^k, \psi_i \right\rangle_X \psi_i.$$

Phương pháp POD bao gồm việc chọn một cơ sở trực chuẩn $\{\psi_i\}_{i \in \mathcal{J}}$ sao cho với bất kì $\ell \in \{1, ..., d^n\}$ sai số trung bình bình phương giữa $n\wp$ phần tử

y_j^k và ℓ thành phần tương ứng trong biểu diễn trên là nhỏ nhất:

$$\begin{cases} \min \sum_{k=1}^{\wp} \sum_{j=1}^{n} \alpha_j^n ||y_j^k - \sum_{i=1}^{\ell} \left\langle y_j^k, \psi_i \right\rangle_X \psi_i||_X^2 \\ \text{s.t } \{\psi_i\}_{i=1}^{\ell} \subset X; \left\langle \psi_i, \psi_j \right\rangle_X = \delta_{ij}, 1 \leq i, j \leq \ell \end{cases} . \qquad (P_n^\ell)$$

Với α_j^n là các trọng số dương và δ_{ij} là kí hiệu Kronecker. Một nghiệm tối ưu của (P_n^ℓ) được gọi là một *cơ sở POD bậc ℓ*. Ta có:

$$\begin{aligned} &||y_j^k - \sum_{i=1}^{\ell} \left\langle y_j^k, \psi_i \right\rangle_X \psi_i||_X^2 \\ &= \left\langle y_j^k - \sum_{i=1}^{\ell} \left\langle y_j^k, \psi_i \right\rangle_X \psi_i, y_j^k - \sum_{h=1}^{\ell} \left\langle y_j^k, \psi_h \right\rangle_X \psi_h \right\rangle_X \\ &= ||y_j^k||^2 - 2 \sum_{i=1}^{\ell} \left\langle y_j^k, \psi_i \right\rangle_X^2 + \sum_{i=1}^{\ell} \sum_{h=1}^{\ell} \left\langle \left\langle y_j^k, \psi_i \right\rangle_X y_j^k, \psi_h \right\rangle_X \langle \psi_i, \psi_h \rangle_X \\ &= ||y_j^k||^2 - \sum_{i=1}^{\ell} \left\langle y_j^k, \psi_i \right\rangle_X^2, \end{aligned} \qquad (1.1)$$

đúng với mọi tập $\{\psi_i\}_{i=1}^{\ell} \subset X$ thỏa mãn $\left\langle \psi_i, \psi_j \right\rangle_X = \delta_{ij}$. Do đó (P_n^ℓ) tương đương với bài toán maximize

$$\begin{cases} \max \sum_{k=1}^{\wp} \sum_{j=1}^{n} \alpha_j^n \sum_{i=1}^{\ell} \left\langle y_j^k, \psi_i \right\rangle_X^2 \\ \text{s.t } \{\psi_i\}_{i=1}^{\ell} \subset X; \left\langle \psi_i, \psi_j \right\rangle_X = \delta_{ij}, 1 \leq i, j \leq \ell \end{cases} . \qquad (\hat{P}_n^\ell)$$

Định nghĩa 1.1. Với X là không gian Hilbert thực và $y_1^k, ... y_n^k$ là snapshot với $1 \leq k \leq \wp$. Ta định nghĩa toán tử tổng:

$$\begin{aligned} \mathcal{R}^n \ : \ & X \longrightarrow X \\ & \psi \longmapsto \sum_{k=1}^{\wp} \sum_{j=1}^{n} \alpha_j^n \left\langle \psi, y_j^k \right\rangle_X y_j^k \end{aligned}, \qquad (1.2)$$

với các trọng số dương α_j^n.

Bổ đề 1.2. *$\mathcal{R}^n$ là toán tử tuyến tính, compact, không âm, tự liên hợp.*

Chứng minh. Với mọi ψ_1 và ψ_2 và 2 số thực x, y ta có:

$$\begin{aligned}\mathcal{R}^n(x\psi_1 + y\psi_2) &= \sum_{k=1}^{\wp}\sum_{j=1}^{n} \alpha_j^n \left\langle x\psi_1 + y\psi_2, y_j^k \right\rangle_X y_j^k \\ &= x\sum_{k=1}^{\wp}\sum_{j=1}^{n} \alpha_j^n \left\langle \psi_1, y_j^k \right\rangle_X y_j^k + y\sum_{k=1}^{\wp}\sum_{j=1}^{n} \alpha_j^n \left\langle \psi_2, y_j^k \right\rangle_X y_j^k \\ &= x\mathcal{R}^n\psi_1 + y\mathcal{R}^n\psi_2.\end{aligned}$$

Do đó $\mathcal{R}^n$ tuyến tính.

Theo bất đẳng thức Cauchy-Schwarz ta có:

$$\begin{aligned}||\mathcal{R}^n\psi||_X &\le \sum_{k=1}^{\wp}\sum_{j=1}^{n} \alpha_j^n| \left\langle \psi, y_j^k \right\rangle_X |||y_j^k||_X \\ &\le \sum_{k=1}^{\wp}\sum_{j=1}^{n} \alpha_j^n ||\psi||_X ||y_j^k||_X ||y_j^k||_X \\ &= (\sum_{k=1}^{\wp}\sum_{j=1}^{n} \alpha_j^n ||y_j^k||_X^2)||\psi||_X.\end{aligned}$$

Do đó $\mathcal{R}^n$ bị chặn. Mặt khác ta có Img$(\mathcal{R}^n) \in V^n$ do đó $\mathcal{R}^n$ có ảnh hữu hạn chiều nên $\mathcal{R}^n$ compact.

Với mọi $\psi \in X$ ta có:

$$\langle \mathcal{R}^n\psi, \psi\rangle_X = \sum_{k=1}^{\wp}\sum_{j=1}^{n} \alpha_j^n \left\langle \psi, y_j^k \right\rangle_X \left\langle \psi, y_j^k \right\rangle_X = \sum_{k=1}^{\wp}\sum_{j=1}^{n} \alpha_j^n \left\langle \psi, y_j^k \right\rangle_X^2 \ge 0.$$

Do đó $\mathcal{R}^n$ không âm.

Với mọi $\psi, \overline{\psi}$ ta có:

$$\left\langle \mathcal{R}^n\psi, \overline{\psi} \right\rangle_X = \sum_{k=1}^{\wp}\sum_{j=1}^{n} \alpha_j^n \left\langle \psi, y_j^k \right\rangle_X \left\langle y_j^k, \overline{\psi} \right\rangle_X$$

$$= \sum_{k=1}^{\wp} \sum_{j=1}^{n} \alpha_j^n \left\langle \overline{\psi}, y_j^k \right\rangle_X \left\langle y_j^k, \psi \right\rangle_X = \left\langle \mathcal{R}^n \overline{\psi}, \psi \right\rangle_X .$$

Do đó $\mathcal{R}^n$ tự liên hợp. □

Do X là không gian Hilbert thực, khả li và $\mathcal{R}^n$ là tuyến tính, compact, không âm, tự liên hợp do đó tồn tại hệ cơ sở trực chuẩn đầy đủ $\{\overline{\psi}_i^n\}_{i\in\mathcal{J}}$ và dãy các giá trị riêng thực tương ứng $\{\overline{\lambda}_i^n\}_{i\in\mathcal{J}}$ thỏa mãn:

$$\mathcal{R}^n \bar{\psi}_i^n = \bar{\lambda}_i^n \bar{\psi}_i^n, \bar{\lambda}_1^n \geq \bar{\lambda}_2^n \geq ... \geq \bar{\lambda}_{d^n}^n > \bar{\lambda}_{d^n+1}^n = ... = 0. \tag{1.3}$$

Nhận xét 1.3. Từ (1.2) và (1.3) ta có:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{\wp} \sum_{j=1}^{n} \alpha_j^n \left\langle y_j^k, \bar{\psi}_i^n \right\rangle_X^2 &= \left\langle \sum_{i=1}^{\wp} \sum_{j=1}^{n} \alpha_j^n \left\langle y_j^k, \bar{\psi}_i^n \right\rangle_X y_j^k, \bar{\psi}_i^n \right\rangle_X \\ &= \left\langle \mathcal{R}^n \bar{\psi}_i^n, \bar{\psi}_i^n \right\rangle_X = \bar{\lambda}_i^n, \forall i \in J. \end{aligned} \tag{1.4}$$

Do đó:

$$\sum_{i=1}^{\wp} \sum_{j=1}^{n} \alpha_j^n \left\langle y_j^k, \bar{\psi}_i^n \right\rangle_X^2 = 0, \forall i > d^n. \tag{1.5}$$

Vì $\{\bar{\psi}_i^n\}_{i\in\mathcal{J}}$ là hệ trực chuẩn đầy đủ nên ta có:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{\wp} \sum_{j=1}^{n} \alpha_j^n ||y_j^k||_X^2 &= \sum_{i=1}^{\wp} \sum_{j=1}^{n} \alpha_j^n \sum_{\nu\in\mathcal{J}} \left\langle y_j^k, \bar{\psi}_\nu^n \right\rangle_X^2 \\ &= \sum_{\nu\in\mathcal{J}} \sum_{i=1}^{\wp} \sum_{j=1}^{n} \alpha_j^n \left\langle y_j^k, \bar{\psi}_\nu^n \right\rangle_X^2 = \sum_{\nu\in\mathcal{J}} \bar{\lambda}_\nu^n = \sum_{i=1}^{d^n} \bar{\lambda}_i^n. \end{aligned} \tag{1.6}$$

Từ (1.6) tổng $\sum_{i\in\mathcal{J}} \bar{\lambda}_i^n$ bị chặn. Theo (1.1) hàm mục tiêu của (P_n^ℓ) có thể viết như sau:

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{\wp} \sum_{j=1}^{n} \alpha_j^n ||y_j^k - \sum_{i=1}^{\ell} \left\langle y_j^k, \psi_i \right\rangle_X \psi_i||_X^2 &= \sum_{i=1}^{d^n} \bar{\lambda}_i^n \\ &- \sum_{k=1}^{\wp} \sum_{j=1}^{n} \alpha_j^n \sum_{i=1}^{\ell} \left\langle y_j^k, \psi_i \right\rangle_X^2 . \end{aligned} \tag{1.7}$$

Bây giờ ta sẽ đưa ra kết quả chính cho bài toán (P_n^ℓ) và ($\hat{P}_n^\ell$):

Định lí 1.4. *Cho X là không gian Hilbert thực, khả li, $y_1^k, ...y_n^k$ với $1 \le k \le \wp$ và $\mathcal{R}^n$ định nghĩa như (1.2). Giả sử $\{\bar{\lambda}_i^n\}_{i\in\mathcal{J}}$ và $\{\bar{\psi}_i^n\}_{i\in\mathcal{J}}$ là các giá trị riêng không âm và các vectơ riêng của $\mathcal{R}^n$ thỏa mãn (1.3). Khi đó, với mọi $\ell \in \{1, ..., d^n\}$, ℓ vectơ riêng đầu tiên $\{\bar{\psi}_i^n\}_{i=1}^\ell$ là nghiệm tối ưu của bài toán (P_n^ℓ) và ($\hat{P}_n^\ell$). Hơn nữa giá trị hàm mục tiêu thỏa mãn:*

$$\sum_{k=1}^{\wp}\sum_{j=1}^{n}\alpha_j^n||y_j^k - \sum_{i=1}^{\ell}\left\langle y_j^k, \bar{\psi}_i\right\rangle_X \bar{\psi}_i||_X^2 = \sum_{i=\ell+1}^{d^n}\bar{\lambda}_i^n, \tag{1.8}$$

và

$$\sum_{k=1}^{\wp}\sum_{j=1}^{n}\alpha_j^n\sum_{i=1}^{\ell}\left\langle y_j^k, \bar{\psi}_i\right\rangle_X^2 = \sum_{i=1}^{\ell}\bar{\lambda}_i^n. \tag{1.9}$$

Chứng minh. Ta chứng minh khẳng định cho ($\hat{P}_n^\ell$) bằng cách sử dụng quy nạp với $\ell \in \{1, ..., d^n\}$.

Với $\ell = 1$ và $\psi \in X$ với $||\psi||_X = 1$.

Do $\{\bar{\psi}_\nu^n\}_{\nu\in\mathcal{J}}$ là hệ cơ sở trực chuẩn đầy đủ. Ta có thể biểu diễn ψ qua hệ này như sau:

$$\psi = \sum_{\nu\in\mathcal{J}}\left\langle\psi, \bar{\psi}_\nu^n\right\rangle_X\bar{\psi}_\nu^n. \tag{1.10}$$

Khi đó hàm mục tiêu của ($\hat{P}_n^\ell$) có thể viết lại như sau:

$$\begin{aligned}
\sum_{k=1}^{\wp}\sum_{j=1}^{n}\alpha_j^n\left\langle y_j^k, \psi\right\rangle_X^2 &= \sum_{k=1}^{\wp}\sum_{j=1}^{n}\alpha_j^n\left\langle y_j^k, \sum_{\nu\in\mathcal{J}}\left\langle\psi, \bar{\psi}_\nu^n\right\rangle_X\bar{\psi}_\nu^n\right\rangle_X^2 \\
&= \sum_{k=1}^{\wp}\sum_{j=1}^{n}\alpha_j^n\sum_{\nu\in\mathcal{J}}\sum_{\mu\in\mathcal{J}}\left(\left\langle y_j^k, \left\langle\psi, \bar{\psi}_\nu^n\right\rangle_X\bar{\psi}_\nu^n\right\rangle_X\left\langle y_j^k, \left\langle\psi, \bar{\psi}_\mu^n\right\rangle_X\bar{\psi}_\mu^n\right\rangle_X\right) \\
&= \sum_{k=1}^{\wp}\sum_{j=1}^{n}\alpha_j^n\sum_{\nu\in\mathcal{J}}\sum_{\mu\in\mathcal{J}}\left(\left\langle y_j^k, \bar{\psi}_\nu^n\right\rangle_X\left\langle y_j^k, \bar{\psi}_\mu^n\right\rangle_X\left\langle\psi, \bar{\psi}_\nu^n\right\rangle_X\left\langle\psi, \bar{\psi}_\mu^n\right\rangle_X\right)
\end{aligned}$$

$$= \sum_{\nu \in \mathcal{J}} \sum_{\mu \in \mathcal{J}} \left(\left\langle \sum_{k=1}^{\wp} \sum_{j=1}^{n} \alpha_j^n \left\langle y_j^k, \bar{\psi}_\nu^n \right\rangle_X y_j^k, \bar{\psi}_\mu^n \right\rangle_X \langle \psi, \bar{\psi}_\nu^n \rangle_X \left\langle \psi, \bar{\psi}_\mu^n \right\rangle_X \right).$$

Từ (1.2), (1.3) và $||\bar{\psi}_\nu^n||_X = 1$ ta có:

$$\sum_{k=1}^{\wp} \sum_{j=1}^{n} \alpha_j^n \left\langle y_j^k, \psi \right\rangle_X^2 = \sum_{\nu \in \mathcal{J}} \sum_{\mu \in \mathcal{J}} \left(\left\langle \bar{\lambda}_\nu^n \bar{\psi}_\nu^n, \bar{\psi}_\mu^n \right\rangle_X \langle \psi, \bar{\psi}_\nu^n \rangle_X \left\langle \psi, \bar{\psi}_\mu^n \right\rangle_X \right)$$
$$= \sum_{\nu \in \mathcal{J}} \bar{\lambda}_\nu^n \langle \psi, \bar{\psi}_\nu^n \rangle_X^2 .$$

Do $\bar{\lambda}_1^n \geq \bar{\lambda}_\nu^n, \ \forall \nu \in \mathcal{J}$, từ (1.4) ta có:

$$\sum_{\nu \in \mathcal{J}} \bar{\lambda}_\nu^n \langle \psi, \bar{\psi}_\nu^n \rangle_X^2 \leq \bar{\lambda}_1^n \sum_{\nu \in \mathcal{J}} \langle \psi, \bar{\psi}_\nu^n \rangle_X^2 = \bar{\lambda}_1^n \|\psi\|_X^2 = \bar{\lambda}_1^n$$
$$= \sum_{k=1}^{\wp} \sum_{j=1}^{n} \alpha_j^n \left\langle y_j^k, \bar{\psi}_1^n \right\rangle_X^2 .$$

Nghĩa là $\bar{\psi}_1^n$ là nghiệm tối ưu của bài toán $(\hat{P}_n^\ell)$ và (1.9) đúng. Từ đó với $\ell = 1$ khẳng định đúng. Chú ý từ (1.7) và (1.9) ta suy ra (1.8).

Giả sử khẳng định đúng với ℓ tức là ta có:

$$\begin{cases} \text{Với } \ell \leq d^n - 1, \ \{\bar{\psi}_i^n\}_{i=1}^{\ell} \subset X \text{ là nghiệm tối ưu của bài toán } (\hat{P}_n^\ell) \\ \displaystyle\sum_{k=1}^{\wp} \sum_{j=1}^{n} \alpha_j^n \sum_{i=1}^{\ell} \left\langle y_j^k, \bar{\psi}_i \right\rangle_X^2 = \sum_{i=1}^{\ell} \bar{\lambda}_i^n \end{cases} . \tag{1.11}$$

Xét bài toán:

$$\begin{cases} \max \displaystyle\sum_{k=1}^{\wp} \sum_{j=1}^{n} \alpha_j^n \sum_{i=1}^{\ell+1} \left\langle y_j^k, \psi_i \right\rangle_X^2 \\ \text{s.t } \{\psi_i\}_{i=1}^{\ell+1} \subset X; \left\langle \psi_i, \psi_j \right\rangle_X = \delta_{ij}, 1 \leq i, j \leq \ell+1 \end{cases} . \tag{$\hat{P}_n^{\ell+1}$}$$

Từ (1.11) ta có $\{\bar{\psi}_i^n\}_{i=1}^{\ell}$ cực đại :

$$\sum_{k=1}^{\wp}\sum_{j=1}^{n}\alpha_j^n\sum_{i=1}^{\ell}\left\langle y_j^k,\psi_i\right\rangle_X^2.$$

Do đó, $(\hat{P}_n^{\ell+1})$ tương đương với

$$\begin{cases}\max\ \displaystyle\sum_{k=1}^{\wp}\sum_{j=1}^{n}\alpha_j^n\left\langle y_j^k,\psi\right\rangle_X^2 \\ \text{s.t } \psi\in X \text{ và } \|\psi\|_X=1, \left\langle\psi,\bar{\psi}_i^n\right\rangle_X=0, 1\le i\le\ell\end{cases}. \tag{1.12}$$

Lấy $\psi\in X$ thỏa mãn $\|\psi\|_X=1$ và $\left\langle\psi,\bar{\psi}_i^n\right\rangle_X=0$ với $i=1,...,\ell$. Khi đó sử dụng biểu diễn (1.10) ta có:

$$\sum_{k=1}^{\wp}\sum_{j=1}^{n}\alpha_j^n\left\langle y_j^k,\psi\right\rangle_X^2=\sum_{\nu\in\mathcal{J}}\bar{\lambda}_\nu^n\left\langle\psi,\bar{\psi}_\nu^n\right\rangle_X^2=\sum_{\nu>\ell}\bar{\lambda}_\nu^n\left\langle\psi,\bar{\psi}_\nu^n\right\rangle_X^2.$$

Do $\bar{\lambda}_{\ell+1}^n\ge\bar{\lambda}_\nu^n$ với mọi $\nu\ge\ell+1$ và từ (1.4) ta có:

$$\begin{aligned}\sum_{k=1}^{\wp}\sum_{j=1}^{n}\alpha_j^n\left\langle y_j^k,\psi\right\rangle_X^2 &\le\bar{\lambda}_{\ell+1}^n\sum_{\nu>\ell}\left\langle\psi,\bar{\psi}_\nu^n\right\rangle_X^2\le\bar{\lambda}_{\ell+1}^n\sum_{\nu\in\mathcal{J}}\left\langle\psi,\bar{\psi}_\nu^n\right\rangle_X^2\\ &=\bar{\lambda}_{\ell+1}^n\|\psi\|_X^2=\bar{\lambda}_{\ell+1}^n=\sum_{k=1}^{\wp}\sum_{j=1}^{n}\alpha_j^n\left\langle y_j^k,\bar{\psi}_{\ell+1}^n\right\rangle_X^2.\end{aligned}$$

Do đó $\bar{\psi}_{\ell+1}^n$ là nghiệm tối ưu của bài toán (1.12) suy ra $\{\bar{\psi}_i^n\}_{i=1}^{\ell+1}$ là nghiệm tối ưu của bài toán $(\hat{P}_n^{\ell+1})$ và:

$$\sum_{k=1}^{\wp}\sum_{j=1}^{n}\alpha_j^n\sum_{i=1}^{\ell+1}\left\langle y_j^k,\bar{\psi}_i\right\rangle_X^2=\sum_{i=1}^{\ell+1}\bar{\lambda}_i^n.$$

Một lần nữa ta có từ (1.7) và (1.9) ta suy ra (1.8). □

Nhận xét 1.5. Định lý cũng có thể được chứng minh bằng cách tiếp cận hàm Lagrange, khi đó (2.6) là các điều kiện tối ưu bậc nhất cho bài toán $(\hat{P}_n^\ell)$ được trình bày trong [11].

Trong việc áp dụng phương pháp POD việc lựa chọn ℓ có vai trò quan trọng. Ta cần lựa chọn ℓ dựa vào việc quan sát tỉ lệ của mô hình được lập và tổng năng lượng trong các snapshot $y_1^k, ..., y_n^k$ với $1 \leq k \leq \wp$, được biểu diễn bởi:

$$\mathcal{E}(\ell) = \frac{\sum_{i=1}^{\ell} \bar{\lambda}_i^n}{\sum_{i=1}^{d^n} \bar{\lambda}_i^n} \in [0, 1].$$

Biểu thức này càng gần 1 thì mô hình của ta càng chính xác. Từ (1.7) ta có:

$$\mathcal{E}(\ell) = \frac{\sum_{i=1}^{\ell} \bar{\lambda}_i^n}{\sum_{k=1}^{\wp} \sum_{j=1}^{n} \alpha_j^n \left\| y_j^k \right\|_X^2}.$$

Nghĩa là việc tính toàn bộ các giá trị riêng $\{\bar{\lambda}_i^n\}_{i=\ell+1}^{d^n}$ là không cần thiết mà ta chỉ cần tính ℓ giá trị riêng đầu tiên để đạt được tỉ lệ mong muốn.

Nhận xét 1.6. (**POD trong** $\mathbb{R}^m$) Giả sử $X = \mathbb{R}^m$ với $m \in \mathbb{N}$ và $\wp = 1$. Khi đó ta có n vectơ snapshot $y_1, ..., y_n$ và ma trận $Y = \left[y_1 | \ldots | y_n\right] \in \mathbb{R}^{m \times n}$ với hạng $d^n \leq \min(m, n)$. Chọn $\alpha_j^n = 1$ với $1 \leq j \leq n$ khi đó bài toán $\left(\mathbf{P}_n^\ell\right)$ có dạng

$$\begin{cases} \min \sum_{j=1}^{n} \left\| y_j - \sum_{i=1}^{\ell} \left(y_j^\top \psi_i \right) \psi_i \right\|_{\mathbb{R}^m}^2 \\ \text{s.t. } \{\psi_i\}_{i=1}^{\ell} \subset \mathbb{R}^m \text{ and } \psi_i^\top \psi_j = \delta_{ij}, 1 \leq i, j \leq \ell, \end{cases}$$

với $\|\cdot\|_{\mathbb{R}^m}$ là chuẩn Euclidean trong $\mathbb{R}^m$ và "$\top$" là kí hiệu của ma trận chuyển vị. Ta có:

$$(\mathcal{R}^n \psi)_i = \left(\sum_{j=1}^{n} \left(y_j^\top \psi \right) y_j \right)_i = \sum_{j=1}^{n} \sum_{l=1}^{m} Y_{lj} \psi_l Y_{ij} = \left(Y Y^\top \psi \right)_i, \quad \psi \in \mathbb{R}^m,$$

với mỗi thành phần $1 \leq i \leq m$, khi đó việc tìm giá trị riêng của $\mathcal{R}^n$ tương đương với bài toán tìm giá trị riêng của ma trận đối xứng:

$$Y Y^\top \bar{\psi}_i^n = \bar{\lambda}_i^n \bar{\psi}_i^n, \quad \bar{\lambda}_1^n \geq \ldots \geq \bar{\lambda}_{d^n}^n > \bar{\lambda}_{d^n+1}^n = \ldots = \bar{\lambda}_m^n = 0.$$

Bài toán trên có thể giải bằng phân tích giá trị kì dị (SVD): Tồn tại các số thực $\bar{\sigma}_1^n \geq \bar{\sigma}_2^n \geq \ldots \geq \bar{\sigma}_{d^n}^n > 0$ và ma trận trực giao $\Psi \in \mathbb{R}^{m\times m}$ với các vectơ cột $\left\{\bar{\psi}_i^n\right\}_{i=1}^m$ và $\Phi \in \mathbb{R}^{n\times n}$ với các vectơ cột $\left\{\bar{\phi}_i^n\right\}_{i=1}^n$ thỏa mãn:

$$\Psi^\top Y \Phi = \begin{pmatrix} D & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} =: \Sigma \in \mathbb{R}^{m\times n},$$

với $D = \operatorname{diag}\left(\bar{\sigma}_1^n, \ldots, \bar{\sigma}_{d^n}^n\right) \in \mathbb{R}^{d^n \times d^n}$ và 0 trong công thức là kí hiệu của ma trận với cỡ phù hợp. Hơn nữa các vectơ $\left\{\bar{\psi}_i^n\right\}_{i=1}^{d^n}$ và $\left\{\bar{\phi}_i^n\right\}_{i=1}^{d^n}$ thoả mãn:

$$Y\bar{\phi}_i^n = \bar{\sigma}_i^n \bar{\psi}_i^n \text{ và } Y^\top \bar{\psi}_i^n = \bar{\sigma}_i^n \bar{\phi}_i^n \quad \text{với } i = 1, \ldots, d^n.$$

Đó là các vectơ riêng tương ứng của $YY^\top$ và $Y^\top Y$, với giá trị riêng $\bar{\lambda}_i^n = \left(\bar{\sigma}_i^n\right)^2 > 0, i = 1, \ldots, d^n$. Các vectơ $\left\{\bar{\psi}_i^n\right\}_{i=d^n+1}^m$ và $\left\{\bar{\phi}_i^n\right\}_{i=d^n+1}^n$ (nếu $d^n < m$ tương ứng $d^n < n$) là các vectơ riêng của $YY^\top$ và $Y^\top Y$ với giá trị riêng 0 . Do đó, trong trường hợp $n < m$ có thể xác định cơ sở POD bậc ℓ như sau: Tính các vectơ riêng $\bar{\phi}_1^n, \ldots, \bar{\phi}_\ell^n \in \mathbb{R}^n$ bằng cách giải bài toán giá trị riêng của ma trận đối xứng cỡ $n \times n$:

$$Y^\top Y \bar{\phi}_i^n = \bar{\lambda}_i^n \bar{\phi}_i^n \quad \text{với } i = 1, \ldots, \ell\,,$$

và khi đó:

$$\bar{\psi}_i^n = \frac{1}{\left(\bar{\lambda}_i^n\right)^{1/2}} Y \bar{\phi}_i^n \quad \text{với } i = 1, \ldots, \ell.$$

Mặt khác, nếu $m < n$, ta có thể có được cơ sở POD bằng cách giải bài toán giá trị riêng $m \times m$. Nếu ma trận Y có chiều khác biệt, ta nên tính $YY^\top$ (hoặc $Y^\top Y$). Trong trường hợp này SVD trở thành một phương pháp số ổn định để tính toán cơ sở POD bậc ℓ.

1.2 Trường hợp liên tục

Lấy $0 \leq t_1 < ... < t_n \leq T$ là lưới thời gian trong đoạn $[0, T]$ với bước lưới $\Delta t = T/(n-1)$, hay $t_j = (j-1)\Delta t$. Giả sử ta có $y^k \in C([0,T], X), 1 \leq k \leq \wp$. Khi đó sanpshot được cho bởi $y_j^k = y^k(t_j) \in X$. Khi đó không gian con snapshot V^n phụ thuộc vào việc chọn t_j. Do đó cơ sở bậc ℓ $\{\bar{\psi}_i^n\}_{i=1}^{\ell}$ tương ứng với các giá trị riêng $\{\bar{\lambda}_i^n\}_{i=1}^{\ell}$ cũng phụ thuộc vào t_j. Hơn nữa ta cũng chưa thảo luận về các trọng số dương $\{\alpha_j^n\}_{j=1}^{n}$ trong bài toán $(\hat{P}_n^{\ell})$. Do đó ta cần tìm hiểu hai câu hỏi:

- Cần lấy n thế nào để các t_j đủ tốt .
- Các trọng số dương $\{\alpha_j^n\}_{j=1}^{n}$ chọn thế nào là thích hợp.

Để giải quyết hai câu hỏi trên ta giới thiệu phiên bản liên tục của phương pháp POD. Ta định nghĩa không gian snapshot bởi:

$$V = \text{span}\,\{y^k(t) | t \in [0,T], 1 \leq k \leq \wp\} \subset X,$$

với số chiều $d \leq \infty$. Với mọi $\ell \leq d$ ta xác định cơ sở POD bậc ℓ bằng cách giải bài toán:

$$\begin{cases} \min \displaystyle\sum_{k=1}^{\wp} \int_0^T ||y^k(t) - \sum_{i=1}^{\ell} \left\langle y^k(t), \psi_i \right\rangle_X \psi_i||_X^2 \mathrm{d}t \\ \text{s.t } \{\psi_i\}_{i=1}^{\ell} \subset X, \left\langle \psi_i, \psi_j \right\rangle_X = \delta_{ij}, 1 \leq i, j \leq \ell \end{cases} . \qquad (P^{\ell})$$

Một nghiệm tối ưu $\{\bar{\psi}_i\}_{i=1}^{\ell}$ của bài toán (P^{ℓ}) được gọi là một cơ sở POD bậc ℓ. Tương tự như bài toán $(\hat{P}_n^{\ell})$ thay vì (P^{ℓ}) ta có thể xét bài toán:

$$\begin{cases} \max \displaystyle\sum_{k=1}^{\wp} \int_0^T \sum_{i=1}^{\ell} \left\langle y^k(t), \psi_i \right\rangle_X^2 \mathrm{d}t \\ \text{s.t } \{\psi_i\}_{i=1}^{\ell} \subset X, \left\langle \psi_i, \psi_j \right\rangle_X = \delta_{ij}, 1 \leq i, j \leq \ell \end{cases} . \qquad (\hat{P}^{\ell})$$

Nghiệm tối ưu của bài toán (P^ℓ) và ($\hat{P}^\ell$) có thể được tính bằng bài toán giá trị riêng của toán tử tích phân tuyến tính:

$$\begin{array}{rcl} \mathcal{R} : X & \longrightarrow & X \\ \psi & \longmapsto & \displaystyle\sum_{k=1}^{\wp} \int_0^T \left\langle y^k(t), \psi \right\rangle_X y^k(t)\mathrm{d}t \end{array}. \tag{1.13}$$

Với không gian Hilbert X ta kí hiệu $L^2(0,T;X)$ là không gian các hàm khả tích bậc hai $t \to \varphi(t) \in X$ nghĩa là :

- Ánh xạ $t \to \varphi(t)$ là đo được với $t \in [0,T]$.
- $\|\varphi\|_{L^2(0,T;X)} = \left(\int_0^T \|\varphi(t)\|_X^2 \mathrm{d}t\right)^{\frac{1}{2}} < \infty.$

cùng với tích vô hướng:

$$\langle \phi, \psi \rangle_{L^2(0,T;X)} = \int_0^T \left\langle \phi(t), \psi(t) \right\rangle_X \mathrm{d}t, \forall \phi, \psi \in L^2(0,T;X).$$

Bổ đề 1.7. *X là không gian Hilbert thực, khả li, $y^k \in H^1(0,T;X)$, $1 \le k \le \wp$ là các quỹ đạo snapshot cho trước. Khi đó toán tử $\mathcal{R}$ là toán tử tuyến tính, không âm, tự liên hợp và compact.*

Chứng minh. Với $\psi_1, \psi_2 \in X$ và hai số thực x, y ta có:

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(x\psi_1 + y\psi_2) &= \int_0^T \left\langle y^k(t), x\psi_1 + y\psi_2 \right\rangle_X y^k(t)\mathrm{d}t \\ &= x \int_0^T \left\langle y^k(t), \psi_1 \right\rangle_X y^k(t)\mathrm{d}t + y \int_0^T \left\langle y^k(t), \psi_2 \right\rangle_X y^k(t)\mathrm{d}t \\ &= x\mathcal{R}\psi_1 + y\mathcal{R}\psi_2. \end{aligned}$$

Do đó $\mathcal{R}$ tuyến tính. Với mọi $\psi \in X$ ta có:

$$\langle \mathcal{R}\psi, \psi \rangle_X = \left\langle \int_0^T \left\langle y^k(t), \psi \right\rangle_X y^k(t)\mathrm{d}t, \psi \right\rangle_X$$

$$= \int_0^T \left| \left\langle y^k(t), \psi \right\rangle_X \right|^2 \mathrm{d}t \geq 0.$$

Do đó $\mathcal{R}$ không âm. Với mọi $\psi, \bar{\psi} \in X$ ta có:

$$\begin{aligned}
\left\langle \mathcal{R}\psi, \bar{\psi} \right\rangle_X &= \left\langle \int_0^T \left\langle y^k(t), \psi \right\rangle_X y^k(t) \mathrm{d}t, \bar{\psi} \right\rangle_X \\
&= \left\langle \int_0^T \left\langle y^k(t), \psi \right\rangle_X \left\langle y^k(t), \bar{\psi} \right\rangle_X \mathrm{d}t \right\rangle_X \\
&= \left\langle \int_0^T \left\langle y^k(t), \bar{\psi} \right\rangle_X y^k(t) \mathrm{d}t, \psi \right\rangle_X \\
&= \left\langle \mathcal{R}\bar{\psi}, \psi \right\rangle_X .
\end{aligned}$$

Do đó $\mathcal{R}$ tự liên hợp. Để chứng minh $\mathcal{R}$ compact đầu tiên ta viết $\mathcal{R}$ là tích của một toán tử và liên hợp của nó trong không gian Hilbert. Ta định nghĩa toán tử tuyến tính $\mathcal{Y} : L^2(0, T; \mathbb{R}^\wp) \to X$ như sau:

$$\mathcal{Y}\phi = \sum_{k=1}^{\wp} \int_0^T \phi^k(t) y^k(t) \mathrm{d}t \quad , \text{với } \phi = \left(\phi^1, \ldots, \phi^\wp\right) \in L^2\left(0, T; \mathbb{R}^\wp\right). \tag{1.14}$$

Theo bất đẳng thức Cauchy-Schwarz và $y^k \in L^2(0, T; X)$ với $1 \leq k \leq \wp$ ta có:

$$\begin{aligned}
\|\mathcal{Y}\phi\|_X &\leq \sum_{k=1}^{\wp} \int_0^T \left|\phi^k(t)\right| \left\|y^k(t)\right\|_X \mathrm{d}t \leq \sum_{k=1}^{\wp} \left\|\phi^k\right\|_{L^2(0,T)} \left\|y^k\right\|_{L^2(0,T;X)} \\
&\leq \left(\sum_{k=1}^{\wp} \left\|\phi^k\right\|^2_{L^2(0,T)} \right)^{1/2} \left(\sum_{k=1}^{\wp} \left\|y^k(t)\right\|^2_X \right)^{1/2} \\
&= Cy\|\phi\|_{L^2(0,T;\mathbb{R}^\wp)} \quad , \text{với mọi } \phi \in L^2\left(0, T; \mathbb{R}^\wp\right).
\end{aligned}$$

ở đó $C_y = \left(\sum_{k=1}^{\wp} \left\|y^k(t)\right\|^2_X \right)^{1/2} < \infty$. Do đó, toán tử $\mathcal{Y}$ bị chặn. Toán tử liên hợp của nó $\mathcal{Y}^\star : X \to L^2(0,T;\mathbb{R}^\wp)$ thỏa mãn:

$$\langle \mathcal{Y}^\star \psi, \phi\rangle_{L^2(0,T;\mathbb{R}^\wp)} = \langle \psi, \mathcal{Y}\phi\rangle_X \quad \text{, với } \psi \in X \text{ và } \phi \in L^2(0,T;\mathbb{R}^\wp).$$

Do đó ta được:

$$\begin{aligned}\langle \mathcal{Y}^\star \psi, \phi\rangle_{L^2(0,T;\mathbb{R}^\wp)} &= \langle \psi, \mathcal{Y}\phi\rangle_X = \left\langle \psi, \sum_{k=1}^{\wp}\int_0^T \phi^k(t) y^k(t)\mathrm{d}t\right\rangle_X \\ &= \sum_{k=1}^{\wp}\int_0^T \left\langle \psi, y^k(t)\right\rangle_X \phi^k(t)\mathrm{d}t = \left\langle \left(\left\langle \psi, y^k(\cdot)\right\rangle_X\right)_{1\le k\le p}, \phi\right\rangle_{L^2(0,T;\mathbb{R}^\wp)}.\end{aligned}$$

với $\psi \in X$ và $\phi \in L^2(0,T;\mathbb{R}^\wp)$, từ đó ta có toán tử liên hợp:

$$(\mathcal{Y}^\star\psi)(t) = \begin{pmatrix} \left\langle \psi, y^1(t)\right\rangle_X \\ \vdots \\ \left\langle \psi, y^\wp(t)\right\rangle_X \end{pmatrix} \quad \text{, với } \psi \in X \text{ và } t \in [0,T] \text{ hầu khắp nơi.}$$

Từ định nghĩa của toán tử $\mathcal{R}$ và:

$$(\mathcal{Y}\mathcal{Y}^\star)\psi = \mathcal{Y}\begin{pmatrix} \left\langle \psi, y^1(\cdot)\right\rangle_X \\ \vdots \\ \left\langle \psi, y^\wp(\cdot)\right\rangle_X \end{pmatrix} = \sum_{k=1}^{\wp}\int_0^T \left\langle \psi, y^k(t)\right\rangle_X y^k(t)\mathrm{d}t,$$

với $\psi \in X$.

Ta được $\mathcal{R} = \mathcal{Y}\mathcal{Y}^\star$. Hơn nữa, lấy $\mathcal{K} = \mathcal{Y}^\star\mathcal{Y} : L^2(0,T;\mathbb{R}^\wp) \to L^2(0,T;\mathbb{R}^\wp)$.

Ta có:

$$(\mathcal{K}\phi)(t) = \begin{pmatrix} \sum_{k=1}^{\wp}\int_0^T \left\langle y^k(s), y^1(t)\right\rangle_X \phi^k(s)\mathrm{d}s \\ \vdots \\ \sum_{k=1}^{\wp}\int_0^T \left\langle y^k(s), y^\wp(t)\right\rangle_X \phi^k(s)\mathrm{d}s \end{pmatrix}, \phi \in L^2(0,T;\mathbb{R}^\wp).$$

Do $\mathcal{Y}$ bị chặn, nên toán tử liên hợp của nó cũng bị chặn và do đó $\mathcal{R} = \mathcal{Y}\mathcal{Y}^\star$ là toán tử bị chặn. Chú ý hàm nhân:

$$r_{ik}(s,t) = \left\langle y^k(s), y^i(t)\right\rangle_X, \quad (s,t) \in [0,T]\times[0,T] \text{ và } 1 \le i,k \le \wp,$$

thuộc $L^2(0,T) \times L^2(0,T)$. Ở đây, ta kí hiệu $L^2(0,T)$ thay cho $L^2(0,T;\mathbb{R})$. Khi đó, toán tử tích phân tuyến tính $\mathcal{K}_{ik} : L^2(0,T) \to L^2(0,T)$ định nghĩa bởi:

$$\mathcal{K}_{ik}(t) = \int_0^T r_{ik}(s,t)\phi(s)\mathrm{d}s, \quad \phi \in L^2(0,T),$$

là toán tử compact. Do đó, toán tử $\sum_{k=1}^{\wp} \mathcal{K}_{ik}$ compact với $1 \le i \le \wp$. Từ đó, $\mathcal{K}$ và $\mathcal{R} = \mathcal{K}^\star$ compact. □

Định lí tiếp theo mô tả cách giải bài toán (P^ℓ) và ($\hat{P}^\ell$):

Định lí 1.8. *X là không gian Hilbert thực, khả li, $y^k \in H^1(0,T;X)$, $1 \le k \le \wp$ là các quỹ đạo snapshot cho trước. Toán tử $\mathcal{R}$ được định nghĩa trong (1.13). Khi đó $\mathcal{R}$ có các vectơ riêng $\{\bar{\psi}_i\}_{i\in\mathcal{J}}$ và các giá trị riêng tương ứng $\{\bar{\lambda}_i\}_{i\in\mathcal{J}}$ với:*

$$\mathcal{R}\bar{\psi}_i = \bar{\lambda}_i\bar{\psi}_i,\ \bar{\lambda}_1 \ge \bar{\lambda}_2 \ge .... \ge 0;\ \lim_{i\to\infty} \bar{\lambda}_i = 0,$$

với mọi $\ell \in \{1,2,...,d\}$, $\{\bar{\psi}_i\}_{i=1}^{\ell}$ là nghiệm tối ưu của bài toán (P^ℓ) và ($\hat{P}^\ell$). Hơn nữa:

$$\sum_{k=1}^{\wp} \int_0^T \sum_{i=1}^{\ell} \left\langle y^k(t), \bar{\psi}_i \right\rangle_X^2 \mathrm{d}t = \sum_{i=1}^{\ell} \bar{\lambda}_i,$$

và

$$\sum_{k=1}^{\wp} \int_0^T ||y^k(t) - \sum_{i=1}^{\ell} \left\langle y^k(t), \bar{\psi}_i \right\rangle_X \bar{\psi}_i||_X^2 \mathrm{d}t = \sum_{i>\ell} \bar{\lambda}_i.$$

Chứng minh. Sự tồn tại các giá trị riêng và vectơ riêng tương ứng là hệ quả trực tiếp của bổ đề phía trên. Phần tiếp theo hoàn toàn tương tự ở chứng minh trong trường hợp rời rạc. □

Nhận xét 1.9. Tương tự trường hợp rời rạc ta có:

$$\sum_{k=1}^{\infty} \int_0^T \left\| y^k(t) \right\|_X^2 \, \mathrm{d}t = \sum_{i=1}^{d} \bar{\lambda}_i. \tag{1.15}$$

Thật vậy,

$$\mathcal{R}\bar{\psi}_i = \sum_{k=1}^{\wp} \int_0^T \left\langle y^k(t), \bar{\psi}_i \right\rangle_X y^k(t)\mathrm{d}t \quad \text{, với mọi } i \in \mathcal{J}.$$

Nhân tích vô hướng với $\bar{\psi}_i$, và lấy tổng theo i ta được:

$$\sum_{i=1}^{d} \sum_{k=1}^{\wp} \int_0^T \left\langle y^k(t), \bar{\psi}_i \right\rangle_X^2 \, \mathrm{d}t = \sum_{i=1}^{d} \left\langle \mathcal{R}\bar{\psi}_i, \bar{\psi}_i \right\rangle_X = \sum_{i=1}^{d} \bar{\lambda}_i.$$

Phân tích $y^k(t) \in X$ theo $\left\{\bar{\psi}_i\right\}_{i\in\mathcal{J}}$ với $1 \leq k \leq \wp$ ta có:

$$y^k(t) = \sum_{i=1}^{d} \left\langle y^k(t), \bar{\psi}_i \right\rangle_X \bar{\psi}_i.$$

và do đó:

$$\sum_{k=1}^{\wp} \int_0^T \left\| y^k(t) \right\|_X^2 \, \mathrm{d}t = \sum_{k=1}^{\wp} \sum_{i=1}^{d} \int_0^T \left\langle y^k(t), \bar{\psi}_i \right\rangle_X^2 \, \mathrm{d}t = \sum_{i=1}^{d} \bar{\lambda}_i.$$

Ta thu được điều cần chứng minh.

Nhận xét 1.10. (**Phân tích SVD**) Giả sử $y^k \in L^2(0, T; X)$. Tồn tại các giá trị riêng không âm $\left\{\bar{\lambda}_i\right\}_{i\in\mathcal{J}}$ và các vectơ riêng trực chuẩn tương ứng $\left\{\bar{\psi}_i\right\}_{i\in\mathcal{J}}$ của $\mathcal{R}$. Do $\mathcal{K} = \mathcal{R}^\star$ từ đó suy ra tồn tại dãy $\left\{\bar{\phi}_i\right\}_{i\in\mathcal{J}}$ sao cho:

$$\mathcal{K}\bar{\phi}_i = \bar{\lambda}_i\bar{\phi}_i, i = \quad 1 \ldots, \ell.$$

Ta đặt $\mathbb{R}_0^+ = \{s \in \mathbb{R} \mid s \geq 0\}$ và $\bar{\sigma}_i = \bar{\lambda}_i^{1/2}$. Dãy $\left\{\bar{\sigma}_i, \bar{\phi}_i, \bar{\psi}_i\right\}_{i\in\mathcal{J}}$ thuộc $\mathbb{R}_0^+ \times L^2\left(0, T; \mathbb{R}^\wp\right) \times X$ có thể hiểu là phân tích giá trị kì dị của $\mathcal{Y} : L^2\left(0, T; \mathbb{R}^\wp\right) \to X$ được định nghĩa trong (1.14). Thật vậy, ta có:

$$\mathcal{Y}\bar{\phi}_i = \bar{\sigma}_i\bar{\psi}_i, \quad \mathcal{Y}^\star\bar{\psi}_i = \bar{\sigma}_i\bar{\phi}_i, \quad i \in \mathcal{J}.$$

Ta nhắc lại không gian $H^1(0,T;X)$ cho bởi:

$$H^1(0,T;X) = \{\varphi \in L^2(0,T;X) | \varphi_t \in L^2(0,T;X)\}.$$

với φ_t là đạo hàm yếu của φ. Không gian $H^1(0,T;X)$ là không gian Hilbert với tích vô hướng:

$$\langle \varphi, \phi \rangle_{H^1(0,T;X)} = \int_0^T \big\langle \varphi(t), \phi(t) \big\rangle_X + \big\langle \varphi_t(t) + \phi_t(t) \big\rangle_X \, \mathrm{d}t,$$

với mọi $\varphi, \phi \in H^1(0,T;X)$, và chuẩn tương ứng

$$||\varphi||_{H^1(0,T;X)} = \langle \varphi, \varphi \rangle^{1/2}_{H^1(0,T;X)}.$$

Ta chọn trọng hình thang:

$$\alpha_1^n = \alpha_n^n = \frac{T}{2(n-1)}; \alpha_j^n = \frac{T}{n-1}, 2 \le j \le n-1. \tag{1.16}$$

Với cách chọn này với mỗi $\psi \in X$ ta có $\mathcal{R}^n \psi$ là xấp xỉ hình thang của $\mathcal{R}\psi$ với $\mathcal{R}^n$ là toán tử được giới thiệu ở phần trước.

Bổ đề 1.11. *X là không gian Hilbert thực, khả li, $y^k \in H^1(0,T;X)$ với $1 \le k \le \wp$ và các trọng số là trọng hình thang. Khi đó $\lim\limits_{n\to\infty} \|\mathcal{R}^n - \mathcal{R}\|_{\mathcal{L}(X)} = 0$.*

Chứng minh. Với $\psi \in X$ với $||\psi||_X = 1$ ta định nghĩa $F : [0,T] \to X$ cho bởi:

$$F(t) = \sum_{k=1}^{\wp} \Big\langle y^k(t), \psi \Big\rangle_X y^k(t),\ t \in [0,T].$$

Khi đó ta có:

$$\begin{aligned} \mathcal{R}\psi &= \int_0^T F(t)dt = \sum_{j=1}^{n-1} \int_{t_j}^{t_{j+1}} F(t)\mathrm{d}t \\ \mathcal{R}^n\psi &= \sum_{j=1}^{n} \alpha_j^n F(t_j) = \frac{\Delta t}{2} \sum_{j=1}^{n-1} (F(t_j) + F(t_{j+1})) \end{aligned}. \tag{1.17}$$

Do $||\psi||_X = 1$ theo bất đẳng thức Cauchy-Schwarz ta có:

$$||F(t)||_X^2 \leq (\sum_{k=1}^{\wp} ||y^k(t)||_X^2)^2. \tag{1.18}$$

Do $y^k \in H^1(0,T;X)$ suy ra $y^k \in C([0,T];X)$ với mọi $1 \leq k \leq \wp$. Do đó từ (1.18) ta có:

$$||F||_{L^2(0,T;X)} \leq \int_0^T (\sum_{k=1}^{\wp} ||y^k||_{C([0,T],X)}^2)^2 \mathrm{d}t \leq T(\sum_{k=1}^{\wp} ||y^k||_{C([0,T],X)}^2)^2 = C_1.$$

Hơn nữa $F \in H^1(0,T;X)$ với:

$$F_t(t) = \sum_{k=1}^{\wp} \left\langle y_t^k(t), \psi \right\rangle_X y^k(t) + \left\langle y^k(t), \psi \right\rangle_X y_t^k(t), \text{ hầu khắp nơi } t \in [0,T].$$

Tiếp tục áp dụng bất đẳng thức Cauchy-Schwarz ta có:

$$||F_t||_{L^2(0,T;X)}^2 \leq 4\int_0^T (\sum_{k=1}^{\wp} ||y^k(t)||_X ||y_t^k(t)||_X)^2 \mathrm{d}t \leq C_2.$$

với $C_2 = 4\sum_{k=1}^{\wp} ||y^k||_{C([0,T];X)}^2 \sum_{k=1}^{\wp} ||y_t^k||_{L^2(0,T;X)}^2 < \infty$. Do đó:

$$||F||_{H^1(0,T;X)} = (\int_0^T ||F(t)||_X^2 + ||F_t(t)||_X^2 \mathrm{d}t)^{1/2} \leq C_3. \tag{1.19}$$

với $C_3 = (C_1 + C_2)^{1/2}$. Ta có:

$$\begin{aligned}
\int_{t_j}^{t_{j+1}} F(t)\mathrm{d}t =& \frac{1}{2}\int_{t_j}^{t_{j+1}} \left(F\left(t_j\right) + \int_{t_j}^{t} F_t(s)\mathrm{d}s \right) \mathrm{d}t \\
&+ \frac{1}{2}\int_{t_j}^{t_{j+1}} \left(F\left(t_{j+1}\right) + \int_{t_{j+1}}^{t} F_t(s)\mathrm{d}s \right) \mathrm{d}t \\
=& \frac{\Delta t}{2}\left(F\left(t_j\right) + F\left(t_{j+1}\right) \right) \\
&+ \frac{1}{2}\int_{t_j}^{t_{j+1}} \left(\int_{t_j}^{t} F_t(s)\mathrm{d}s + \int_{t_{j+1}}^{t} F_t(s)\mathrm{d}s \right) \mathrm{d}t.
\end{aligned} \tag{1.20}$$

Từ (1.17) và (1.20) ta có:

$$
\begin{aligned}
\|\mathcal{R}^n\psi - \mathcal{R}\psi\|_X &= \left\| \sum_{j=1}^{n-1} \left(\frac{\Delta t}{2} \Big(F\left(t_j\right) + F\left(t_{j+1}\right) \Big) - \int_{t_j}^{t_{j+1}} F(t)\mathrm{d}t \right) \right\|_X \\
&\le \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{n-1} \left\| \int_{t_j}^{t_{j+1}} \int_{t_j}^{t} F_t(s)\mathrm{d}s\mathrm{d}t \right\|_X + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{n-1} \left\| \int_{t_j}^{t_{j+1}} \int_{t_{j+1}}^{t} F_t(s)\mathrm{d}s\mathrm{d}t \right\|_X .
\end{aligned}
$$

Áp dụng bất đẳng thức cauchy-schwarz và định lí Bochner ta có:

$$
\begin{aligned}
\sum_{j=1}^{n-1} \left\| \int_{t_j}^{t_{j+1}} \int_{t_j}^{t} F_t(s)\mathrm{d}s\mathrm{d}t \right\|_X &\le \sum_{j=1}^{n-1} \int_{t_j}^{t_{j+1}} \left\| \int_{t_j}^{t} F_t(s)\mathrm{d}s \right\|_X \mathrm{d}t \\
&\le \sqrt{\Delta t} \sum_{j=1}^{n-1} \left(\int_{t_j}^{t_{j+1}} \left\| \int_{t_j}^{t} F_t(s)\mathrm{d}s \right\|_X^2 \mathrm{d}t \right)^{1/2} \\
&\le \sqrt{\Delta t} \sum_{j=1}^{n-1} \left(\int_{t_j}^{t_{j+1}} \left(\int_{t_j}^{t} \left\|F_t(s)\right\|_X \mathrm{d}s \right)^2 \mathrm{d}t \right)^{1/2} \\
&\le \Delta t \sum_{j=1}^{n-1} \left(\int_{t_j}^{t_{j+1}} \int_{t_j}^{t} \left\|F_t(s)\right\|_X^2 \mathrm{d}s\mathrm{d}t \right)^{1/2} \le T\sqrt{\Delta t} \|F\|_{H^1(0,T;X)}.
\end{aligned} \tag{1.21}
$$

Tương tự ta cũng đánh giá được:

$$
\sum_{j=1}^{n-1} \left\| \int_{t_j}^{t_{j+1}} \int_{t_{j+1}}^{t} F_t(s)\mathrm{d}s\mathrm{d}t \right\|_X \le T\sqrt{\Delta t} \|F\|_{H^1(0,T;X)}. \tag{1.22}
$$

Từ (1.19), (1.21) và (1.22) ta có:

$$
||\mathcal{R}^n\psi - \mathcal{R}\psi||_X \le \frac{C_3 T^{3/2}}{\sqrt{n-1}}.
$$

do C_3, T không phụ thuộc vào n, ψ do đó:

$$
||\mathcal{R}^n - \mathcal{R}||_{\mathcal{L}(X)} = \sup_{||\psi||_X = 1} ||\mathcal{R}^n\psi - \mathcal{R}\psi||_X \to 0, \text{ khi } n \to \infty
$$

Hay $\mathcal{R}^n$ hội tụ đến $\mathcal{R}$ trong $\mathcal{L}(X)$. $\square$

Ta giả sử $y^k \in H^1(0,T;X)$ với $1 \le k \le \wp$. Do đó $y^k \in C([0,T];X)$, điều này suy ra:

$$\sum_{k=1}^{\wp}\sum_{j=1}^{n}\alpha_j^n \left\|y^k\left(t_j\right)\right\|_X^2 \to \sum_{k=1}^{\wp}\int_0^T \left\|y^k(t)\right\|_X^2 \,\mathrm{d}t \quad \text{, khi } n \to \infty. \tag{1.23}$$

Kết hợp (1.23) với (1.4) và (1.15) ta được:

$$\sum_{i=1}^{d^n}\bar{\lambda}_i^n \to \sum_{i=1}^{d}\bar{\lambda}_i \quad \text{, khi } n \to \infty. \tag{1.24}$$

Ta cố định:

$$\ell \text{ thỏa mãn } \bar{\lambda}_\ell \neq \bar{\lambda}_{\ell+1}. \tag{1.25}$$

Khi đó, theo phân tích phổ của toán tử compact [12] và bổ đề (1.11) ta được:

$$\bar{\lambda}_i^n \to \bar{\lambda}_i \quad \text{, với } 1 \le i \le \ell \text{ khi } n \to \infty. \tag{1.26}$$

Kết hợp (1.24) và (1.26) ta có:

$$\sum_{i=\ell+1}^{d^n}\bar{\lambda}_i^n \to \sum_{i=\ell+1}^{d}\bar{\lambda}_i \quad \text{, khi } n \to \infty.$$

Từ (1.25) và bổ để (1.11) ta có $\lim_{n\to\infty}\left\|\bar{\psi}_i^n - \bar{\psi}_i\right\|_X = 0$ với $i = 1, \ldots, \ell$.

Các kết quả được đưa ra trong định lí sau:

Định lí 1.12. *Cho X là không gian Hilbert thực, khả li, với trọng số $\left\{\alpha_j^n\right\}_{j=1}^n$ là trọng hình thang và $y^k \in H^1(0,T;X)$ với $1 \le k \le \wp$. Đặt $\left\{\left(\bar{\psi}_i^n, \bar{\lambda}_i^n\right)\right\}_{i\in\mathcal{J}}$ và $\left\{\left(\bar{\psi}_i, \bar{\lambda}_i\right)\right\}_{i\in\mathcal{J}}$ là các cặp vectơ riêng và giá trị riêng của $\mathcal{R}^n$ và $\mathcal{R}$. Với $\ell \in \mathbb{N}$ cố định sao cho (1.25) đúng. Khi đó ta có:*

$$\lim_{n\to\infty}\left|\bar{\lambda}_i^n - \bar{\lambda}_i\right| = \lim_{n\to\infty}\left\|\bar{\psi}_i^n - \bar{\psi}_i\right\|_X = 0 \quad \text{với } 1 \le i \le \ell,$$

và

$$\lim_{n\to\infty}\sum_{i=\ell+1}^{d^n}\bar{\lambda}_i^n = \sum_{i=\ell+1}^{d}\bar{\lambda}_i.$$

Nhận xét 1.13. Định lí (1.12) đưa ra câu trả lời cho hai câu hỏi ta đặt ra ở đầu phần này: $\left\{t_j\right\}_{j=1}^n$ và các trọng số $\left\{\alpha_j^n\right\}_{j=1}^n$ nên được chọn sao cho $\mathcal{R}^n$ là xấp xỉ $\mathcal{R}$ và $\|\mathcal{R}^n - \mathcal{R}\|_{\mathcal{L}(X)}$ là nhỏ (với n phù hợp). Ngoài ra ta cũng có thể chọn $\left\{\alpha_j^n\right\}_{j=1}^n$ theo cách khác. Ví dụ, ta có thể chọn trọng Simpson.

Chú ý ở đây ta để khoảng $[0, T]$ nhưng thực tế có thể là khoảng $[a, b]$.

Chương 2

Phương pháp POD-Galerkin cho phương trình elliptic

2.1 Bài toán biên Robin cho phương trình elliptic

Giả sử Ω là miền bị chặn trong $\mathbb{R}^d$ với biên Lipschitz. Ta xét phương trình elliptic có dạng sau:

$$-c\Delta u + \beta \cdot \nabla u + qu = f \qquad \text{trong } \Omega, \tag{2.1}$$

$$c\frac{\partial u}{\partial n} + \sigma u = g \qquad \text{trên } \Gamma = \partial\Omega, \tag{2.2}$$

với $f \in L^2(\Omega)$ và $g \in L^2(\Gamma)$, $c > 0, \beta \in \mathbb{R}^d$, $q > 0$, $\sigma \in \mathbb{R}$, u thuộc $H^1(\Omega)$. Điều kiện của các tham số c, q, β, và σ để tồn tại nghiệm yếu duy nhất của phương trình sẽ được đưa ra ở phần sau. Trong điều kiện biên Robin (2.2), n là kí hiệu của vectơ pháp tuyến ngoài. Ta định nghĩa toán tử tuyến tính $L : H^1(\Omega) \to H^1(\Omega)'$ cho bởi:

$$\begin{aligned}\langle Lu, \varphi\rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)} = c\int_\Omega \nabla u \cdot \nabla\varphi \mathrm{d}x + \sigma\int_\Gamma u\varphi \mathrm{d}s \\ +q\int_\Omega u\varphi \mathrm{d}x + \int_\Omega \beta\cdot\nabla u\varphi \mathrm{d}x,\end{aligned}$$

với $u, \varphi \in H^1(\Omega)$. Ở phần tiếp theo ta sẽ chứng minh L bị chặn và do đó liên tục.

Ta định nghĩa ánh xạ tuyến tính $F : H^1(\Omega) \to \mathbb{R}$ cho bởi:

$$\langle F, \varphi \rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)} = \int_\Omega f\varphi \mathrm{d}x + \int_\Gamma g\varphi \mathrm{d}s \text{ với } \varphi \in H^1(\Omega). \tag{2.3}$$

Vì $f \in L^2(\Omega)$ và $g \in L^2(\Gamma)$, F bị chặn và do đó, $F \in H^1(\Omega)'$.

Định nghĩa 2.1. Hàm u được gọi là nghiệm yếu của (2.1) nếu:

$$Lu = F \text{ trong } H^1(\Omega)'. \tag{2.4}$$

Nói cách khác,

$$\langle Lu, \varphi \rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)} = \langle F, \varphi \rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)}, \text{ với mọi } \varphi \in H^1(\Omega). \tag{2.5}$$

Ta nhắc lại định lí quan trọng Lax-Milgram.

Định lí 2.2. ***(Lax-Milgram)*** *Cho V là không gian Hilbert và*

$$B : V \times V \to \mathbb{R},$$

là ánh xạ song tuyến tính sao cho tồn tại hằng số $\alpha_1, \alpha_2 > 0$ thỏa mãn điều kiện liên tục:

$$|B(u, v)| \leq \alpha_1 \|u\|_V \|v\|_V, \text{ với mọi } u, v \in V,$$

và điều kiện bức:

$$\alpha_2 \|u\|_V^2 \leq B(u, u), \text{ với mọi } u \in V,$$

Lấy $F \in V'$. Khi đó tồn tại duy nhất phần tử $u \in V$ thỏa mãn:

$$B(u, v) = \langle F, v \rangle_{V', V}, \text{ với mọi } v \in V,$$

Lấy $0 < q_l \leq q_u$ cho trước $V = H^1(\Omega)$. Với mọi tham số $q \in \mathcal{I} = [q_l, q_u]$ ta định nghĩa dạng song tuyến tính (có tham số) $B(\cdot,\cdot;q) : H^1(\Omega)\times H^1(\Omega) \to \mathbb{R}$ tương ứng với phương trình elliptic cho bởi:

$$\begin{aligned} B(u,\phi;q) = \int_\Omega c\nabla u\cdot\nabla\phi + qu\phi + \beta\cdot\nabla u\phi \mathrm{d}x + \sigma\int_\Gamma u\phi \mathrm{d}s \\ = \langle Lu,\phi\rangle_{H^1(\Omega)',H^1(\Omega)} \end{aligned}, \tag{2.6}$$

với $u,\phi \in H^1(\Omega)$ và hàm $F \in H^1(\Omega)'$ cho bởi (2.3).

Mệnh đề 2.3. *Lấy $q \in \mathcal{I}$. Nếu:*

$$\alpha_2 := \min\left\{\frac{c}{2}, q - \frac{\|\beta\|^2_{\mathbb{R}^d}}{2c}\right\} + \min\left\{0, \sigma C_\Gamma^2\right\} > 0, \tag{2.7}$$

đúng (với C_Γ là kí hiệu của hằng số vết), khi đó tồn tại duy nhất nghiệm yếu u của (2.1).

Chứng minh. Ta cần kiểm tra điều kiện liên tục và điều kiện bức của định lí Lax-Milgram cho dạng song tuyến tính $B(\cdot,\cdot;q)$ với mọi $q \in \mathcal{I}$. Áp dụng bất đẳng thức Cauchy-Schwarz và định lí vết ta có:

$$\begin{aligned} |B(u,v;q)| = &|\ c\langle\nabla u,\nabla v\rangle_{L^2(\Omega)^d} + \sigma\langle u,v\rangle_{L^2(\Gamma)} + q\langle u,v\rangle_{L^2(\Omega)} \\ &+ \int_\Omega\langle\beta,\nabla u(x)\rangle_{\mathbb{R}^d}v(x)\mathrm{d}x\ | \\ \leq& c\|\nabla u\|_{L^2(\Omega)^d}\|\nabla v\|_{L^2(\Omega)^d} + |\sigma|\|u\|_{L^2(\Gamma)}\|v\|_{L^2(\Gamma)} \\ &+ q\|u\|_{L^2(\Omega)}\|v\|_{L^2(\Omega)} + \int_\Omega\|\beta\|_{\mathbb{R}^d}\|\nabla u(x)\|_{\mathbb{R}^d}|v(x)|\mathrm{d}x \\ \leq& c\|\nabla u\|_{L^2(\Omega)^d}\|\nabla v\|_{L^2(\Omega)^d} + |\sigma|C_\Gamma^2\|u\|_{H^1(\Omega)}\|v\|_{H^1(\Omega)} \\ &+ q\|u\|_{L^2(\Omega)}\|v\|_{L^2(\Omega)} + \|\beta\|_{\mathbb{R}^d}\left\langle\|\nabla u\|_{\mathbb{R}^d},|v|\right\rangle_{L^2(\Omega)} \\ \leq& c\|u\|_{H^1(\Omega)}\|v\|_{H^1(\Omega)} + |\sigma|C_\Gamma^2\|u\|_{H^1(\Omega)}\|v\|_{H^1(\Omega)} \\ &+ q\|u\|_{H^1(\Omega)}\|v\|_{H^1(\Omega)} + \|\beta\|_{\mathbb{R}^d}\|\nabla u\|_{L^2(\Omega)^d}\|v\|_{L^2(\Omega)} \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&\le c\|u\|_{H^1(\Omega)}\|v\|_{H^1(\Omega)} + |\sigma| C_\Gamma^2 \|u\|_{H^1(\Omega)}\|v\|_{H^1(\Omega)} \\
&\quad + q\|u\|_{H^1(\Omega)}\|v\|_{H^1(\Omega)} + \|\beta\|_{\mathbb{R}^d}\|u\|_{H^1(\Omega)}\|v\|_{H^1(\Omega)} \\
&= \left(c + |\sigma| C_\Gamma^2 + q + \|\beta\|_{\mathbb{R}^d}\right)\|u\|_{H^1(\Omega)}\|v\|_{H^1(\Omega)}.
\end{aligned}
$$

Đặt $\alpha_1 := c + |\sigma| C_\Gamma^2 + q + \|\beta\|_{\mathbb{R}^d} > 0$, điều kiện liên tục của định lí Lax-Milgram được thỏa mãn.

Tiếp theo ta tìm điều kiện của tham số trong phương trình elliptic sao cho điều kiện bức được thỏa mãn. Lấy $u \in H^1(\Omega)$ và $q \in \mathcal{I}$.

Áp dụng bất đẳng thức Young, ta có:

$$
\begin{aligned}
B(u, u; q) =& c\|\nabla u\|^2_{L^2(\Omega)^d} + \sigma\|u\|^2_{L^2(\Gamma)} + q\|u\|^2_{L^2(\Omega)} \\
&+ \int_\Omega \langle \beta, \nabla u(x)\rangle_{\mathbb{R}^d} u(x)\mathrm{d}x \\
\ge& c\|\nabla u\|^2_{L^2(\Omega)^d} - \int_\Omega \|\beta\|_{\mathbb{R}^d}\|\nabla u(x)\|_{\mathbb{R}^d}|u(x)|\mathrm{d}x + q\,\|u\|^2_{L^2(\Omega)} \\
&+ \sigma\|u\|^2_{L^2(\Gamma)} \\
\ge& c\|\nabla u\|^2_{L^2(\Omega)^d} - \|\beta\|_{\mathbb{R}^d}\left\langle \|\nabla u\|_{\mathbb{R}^d}, |u|\right\rangle_{L^2(\Omega)} + q\|u\|^2_{L^2(\Omega)} \\
&+ \sigma\|u\|^2_{L^2(\Gamma)} \\
\ge& c\|\nabla u\|^2_{L^2(\Omega)^d} - \|\beta\|_{\mathbb{R}^d}\left(\frac{c}{2\|\beta\|_{\mathbb{R}^d}}\|\nabla u\|^2_{L^2(\Omega)^d} + \frac{\|\beta\|_{\mathbb{R}^d}}{2c}\|u\|^2_{L^2(\Omega)}\right) \\
&+ q\|u\|^2_{L^2(\Omega)} + \sigma\|u\|^2_{L^2(\Gamma)}.
\end{aligned}
$$

Nếu $\sigma \ge 0$, ta có:

$$
\begin{aligned}
\langle F, u\rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)} = B(u, u; q) &\ge \frac{c}{2}\|\nabla u\|^2_{L^2(\Omega)^d} + \left(q - \frac{\|\beta\|^2_{\mathbb{R}^d}}{2c}\right)\|u\|^2_{L^2(\Omega)} \\
&\ge \min\left\{\frac{c}{2}, q - \frac{\|\beta\|^2_{\mathbb{R}^d}}{2c}\right\}\left(\|\nabla u\|^2_{L^2(\Omega)^d} + \|u\|^2_{L^2(\Omega)}\right) \\
&= \min\left\{\frac{c}{2}, q - \frac{\|\beta\|^2_{\mathbb{R}^d}}{2c}\right\}\|u\|^2_{H^1(\Omega)}.
\end{aligned}
$$

Do $c > 0$, ta chỉ cần đảm bảo $q - \frac{\|\beta\|^2_{\mathbb{R}^d}}{2c} > 0$. Nếu $\sigma < 0$, từ định lí vết ta có:

$$\sigma\|u\|^2_{L^2(\Gamma)} \geq \sigma C_\Gamma^2 \|u\|^2_{H^1(\Omega)},$$

và do đó:

$$\begin{aligned} B(u,u;q) &\geq \min\left\{\frac{c}{2}, q - \frac{\|\beta\|^2_{\mathbb{R}^d}}{2c}\right\}\left(\|\nabla u\|^2_{L^2(\Omega)^d} + \|u\|^2_{L^2(\Omega)}\right) \\ &\quad + \sigma C_\Gamma^2\|u\|^2_{H^1(\Omega)} \\ &= \left(\min\left\{\frac{c}{2}, q - \frac{\|\beta\|^2_{\mathbb{R}^d}}{2c}\right\} + \sigma C_\Gamma^2\right)\|u\|^2_{H^1(\Omega)}. \end{aligned}$$

Do đó, nếu ta có $c > 0, q > 0, \beta \in \mathbb{R}^d, \sigma \in \mathbb{R}$ thỏa mãn (2.7), các điều kiện của định lí Lax-Milgram được thỏa mãn và do đó (2.1) có duy nhất nghiệm yếu u. $\square$

Nhận xét 2.4. Theo chứng minh của mệnh đề (2.3) với mọi $q \in \mathcal{I}$:

$$B(u,u;q) \geq \alpha(q)\|u\|^2_{H^1(\Omega)} \text{ với mọi } u \in H^1(\Omega),$$

với:

$$\alpha(q) = \min\left\{\frac{c}{2}, q - \frac{\|\beta\|^2_{\mathbb{R}^d}}{2c}\right\} + \min\left\{0, \sigma C_\Gamma^2\right\} > 0.$$

Hệ quả 2.5. *Giả sử các giả định của mệnh đề (2.3) được thỏa mãn. Khi đó:*

$$\|u\|_{H^1(\Omega)} \leq \frac{1}{\alpha_2}\|F\|_{H^1(\Omega)'},$$

với α_2 đưa ra trong (2.7).

Chứng minh. Từ chứng minh của mệnh đề (2.3) ta được:

$$\begin{aligned} \alpha_2\|u\|^2_{H^1(\Omega)} &\leq B(u,u;q) = \langle F, u\rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)} \leq \|F\|_{H^1(\Omega)'}\|u\|_{H^1(\Omega)} \\ &\leq \frac{1}{2\alpha_2}\|F\|^2_{H^1(\Omega)'} + \frac{\alpha_2}{2}\|u\|^2_{H^1(\Omega)}. \end{aligned}$$

Từ đó ta nhận được ước lượng tiên nghiệm của u theo chuẩn trong $H^1(\Omega)$. $\square$

2.2 Phương pháp phần tử hữu hạn

Nếu bài toán giá trị biên được đưa về dạng phương trình biến phân, khi đó ta có thể rời rạc và giải nó bằng xấp xỉ phần tử hữu hạn.

Ta coi hàm $u : \Omega \to \mathbb{R}$ là một tổ hợp tuyến tính của tập hợp hữu hạn các hàm cơ sở, được gọi là phần tử hữu hạn. Tức là:

$$u^h(x) = \sum_{i=1}^{n_{FE}} \mathrm{u}_i \varphi_i(x), \tag{2.8}$$

với n_{FE} là số lượng phần tử hữu hạn, $\{\varphi_i\}_{i=1}^{n_{FE}}$ là tập hợp các hàm cơ sở phần tử hữu hạn, và $\{\mathrm{u}_i\}_{i=1}^{n_{FE}}$ là tập hợp các hệ số tương ứng. Các hệ số này là chưa biết và sẽ cần tìm.

Ta định nghĩa V^h là tập tất cả các hàm có thể viết như (2.8), $V^h = \mathrm{span}\,\{\varphi_i\}_{i=1}^{n_{FE}}$. Ở đây ta chọn cơ sở tuyến tính từng khúc $\{\varphi_i\}_{i=1}^{n_{FE}}$, do đó $V^h \subset H^1(\Omega)$. Số lượng phần tử hữu hạn cần được chọn đủ nhiều để ta có được một xấp xỉ nghiệm đủ tốt.

Các phần tử hữu hạn độc lập tuyến tính được đặc trưng theo cách mỗi phần tử khác không chỉ trên một miền xung quanh một điểm lưới của Ω. Hơn nữa mọi điểm x trong miền được bao hàm bởi đúng một hàm cơ sở phần tử hữu hạn có giá trị lớn hơn 0 tại x. Các hàm cơ sở phần tử hữu hạn nên được chọn đơn giản để giảm thời gian tính toán. Sự rời rạc của miền có thể được thực hiện theo nhiều cách. Một số biến thể thường được sử dụng cho các bài toán hai chiều là áp dụng lưới tam giác hoặc lưới chữ nhật của miền.

Từ bài toán giá trị biên (2.1) ta được phương trình biến phân:

$$B(u, v; q) = \langle F, v\rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)}, \text{ với mọi } v \in H^1(\Omega) \text{ và } q \in \mathcal{I}.$$

Bây giờ ta có bài toán biến phân rời rạc:

$$B\left(u^h, v^h; q\right) = \left\langle F, v^h \right\rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)}, \text{ với mọi } v^h \in V^h(\Omega) \text{ và } q \in \mathcal{I}, \tag{2.9}$$

với u^h cho trong (2.8) và v^h là một tổ hợp tuyến tính bất kì của các phần tử hữu hạn:

$$v^h(x) = \sum_{i=1}^{n_{FE}} \mathrm{v}_i \varphi_i(x).$$

Sự tồn tại duy nhất của u^h trong (2.9) theo định lí Lax-Milgram , ở đây ta cần các giả thiết như đã nêu ở phần trước cho hằng số c, q, σ, and β, bởi vì ta đang làm việc trên một tập con đóng của $H^1(\Omega)$. Chọn $v^h = \varphi_j$ ta có:

$$B\left(u^h, \varphi_j; q\right) = \left\langle F, \varphi_j \right\rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)}, \quad 1 \leq j \leq n_{FE}.$$

Thay (2.8) vào biểu thức trên ta có:

$$B\left(\sum_{i=1}^{n_{FE}} \mathrm{u}_i \varphi_i(x), \varphi_j; q\right) = \left\langle F, \varphi_j \right\rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)}, \quad 1 \leq j \leq n_{FE}.$$

Do $B(\cdot, \cdot; q)$ là song tuyến tính với mọi $q \in \mathcal{I}$ ta được:

$$\sum_{i=1}^{n_{FE}} B\left(\varphi_i, \varphi_j; q\right) \mathrm{u}_i = \left\langle F, \varphi_j \right\rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)}, \quad 1 \leq j \leq n_{FE}. \tag{2.10}$$

Khi biết $B(\cdot, \cdot; q)$ và hàm F ta có thể tính:

$$\mathrm{B}_{ij} = B\left(\varphi_i, \varphi_j; q\right) \text{ với } 1 \leq i, j \leq n_{FE}, \tag{2.11}$$

và:

$$\mathrm{F}_j = \left\langle F, \varphi_j \right\rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)} \text{ với } 1 \leq j \leq n_{FE}. \tag{2.12}$$

Từ đó ta được n_{FE} phương trình cho n_{FE} biến $\mathrm{u}_1, \ldots, \mathrm{u}_{n_{FE}}$ và ta có thể giải hệ tuyến tính $\mathrm{B}^T\mathrm{u} = \mathrm{F}$ có nghiệm duy nhất, với $\mathrm{B} = \left(\left(\mathrm{B}_{ij}\right)\right) \in \mathbb{R}^{n_{FE} \times n_{FE}}$, $\mathrm{u} = (\mathrm{u}_i) \in \mathbb{R}^{n_{FE}}$, và $\mathrm{F} = \left(\mathrm{F}_j\right) \in \mathbb{R}^{n_{FE}}$. Điều này tuân theo định lí Lax-Milgram.

2.3 Tìm cơ sở POD

Trong trường hợp ta biết nghiệm yếu $u(q)$ trên cả lưới $\mathcal{I} = [q_l, q_u]$ ta sẽ áp dụng phiên bản liên tục POD để tìm cơ sở POD.

Trong thực tế ta thường không biết nghiệm yếu $u(q)$ trên cả lưới $\mathcal{I} = [q_l, q_u]$ mà chỉ biết nghiệm yếu trên một lưới của $\mathcal{I}$.

Giả sử snapshot trên một lưới của $\mathcal{I} = [q_l, q_u]$ có được bằng cách giải phương trình bằng phương pháp phần tử hữu hạn có dạng:

$$y_j^h(x) = \sum_{l=1}^{n_{FE}} Y_{lj}\varphi_l(x), j = 1, \ldots, n,$$

với $Y \in \mathbb{R}^{n_{FE}\times n}$ là ma trận chứa các hệ số trong cách tiếp cận Galerkin cho mỗi snapshot trong mỗi cột $Y_{\cdot,j} = \mathrm{y}_j \in \mathbb{R}^{n_{FE}}, j = 1, \ldots, n$. Các hàm $\{\varphi_l\}_{l=1}^{n_{FE}}$ là kí hiệu của các hàm theo cách tiếp cận phần tử hữu hạn.

Các hàm cơ sở POD (mà ta đang tìm) có thể được viết dưới dạng tổ hợp tuyến tính của các hàm phần tử hữu hạn:

$$\psi_i^h(x) = \sum_{k=1}^{n_{FE}} \mathrm{U}_{ki}\varphi_k(x), i = 1 \ldots, \ell. \tag{2.13}$$

Khi đó theo chương trước phiên bản liên tục có thể xấp xỉ như sau (với α_j là trọng hình thang, $j = 1, \ldots, n$):

$$\min_{\psi_1^h,\ldots,\psi_\ell^h} \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \left\| y_j^h - \sum_{i=1}^{\ell} \left\langle y_j^h, \psi_i^h \right\rangle_{L^2(\Omega)} \psi_i^h \right\|_{L^2(\Omega)}^2 \quad \text{s.t.} \ \left\langle \psi_i^h, \psi_j^h \right\rangle_{L^2(\Omega)} = \delta_{ij}. \tag{2.14}$$

Cũng tương đương với bài toán max

$$\max_{\psi_1^h,\ldots,\psi_\ell^h} \sum_{i=1}^{\ell} \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \left| \left\langle y_j^h, \psi_i^h \right\rangle_{L^2(\Omega)} \right|^2 \ \text{s.t.} \ \left\langle \psi_i^h, \psi_j^h \right\rangle_{L^2(\Omega)} = \delta_{ij}. \tag{2.15}$$

Đặt M_{ij} là kí hiệu của tích vô hướng trong L^2 của các hàm cơ sở theo phương pháp phần tử hữu hạn φ_i và φ_j, tương ứng. Tức là:

$$M_{ij} = \int_\Omega \varphi_i(x)\varphi_j(x)\mathrm{d}x. \tag{2.16}$$

Khi đó ma trận $M = \Big(\big(M_{ij}\big)\Big) \in \mathbb{R}^{n_{FE}\times n_{FE}}$ được gọi là ma trận khối lượng. Nếu ta lấy tích vô hướng trong H^1 thay vì tích vô hướng trong L^2 trong (2.15), ta được ma trận độ cứng $S = \Big(\big(S_{ij}\big)\Big) \in \mathbb{R}^{n_{FE}\times n_{FE}}$ với:

$$S_{ij} = \int_\Omega \big(\varphi_i(x)\varphi_j(x) + \nabla\varphi_i(x)\cdot\nabla\varphi_j(x)\big)\,\mathrm{d}x. \tag{2.17}$$

Do đó, ta có:

$$\begin{aligned}\left\langle y_j^h, \psi_i^h \right\rangle_{L^2(\Omega)} &= \int_\Omega y_j^h(x)\psi_i^h(x)\mathrm{d}x = \sum_{l=1}^{n_{FE}}\sum_{k=1}^{n_{FE}} Y_{lj}\int_\Omega \varphi_l(x)\varphi_k(x)\mathrm{d}x\mathrm{U}_{ki}\\ &= \sum_{l=1}^{n_{FE}}\sum_{k=1}^{n_{FE}} Y_{jl}^T W_{lk}\mathrm{U}_{ki} = \big(Y_{\cdot,j}\big)^T W\mathrm{U}_{\cdot,i},\end{aligned}$$

với $W = M$. Nếu ta chọn tích vô hướng trong H^1, ta cũng có

$$\left\langle y_j^h, \psi_i^h \right\rangle_{H^1(\Omega)} = \big(Y_{\cdot,j}\big)^T WU_{\cdot,i},$$

với $W = S$.

Như đã thấy, tích vô hướng trong L^2 của hai hàm phần tử hữu hạn y_j^h và ψ_i^h có thể tính bằng tích $\big(Y_{,j}\big)^T M\mathrm{U}_{\cdot,i}$, với $Y_{\cdot,j}$ là vectơ cột chứa các hệ số theo cơ sở phần tử hữu hạn của các snapshot y_j^h, và $\mathrm{U}_{\cdot,i}$ là vectơ các hệ số theo cơ sở phần tử hữu hạn của cơ sở POD ψ_i^h , mục tiêu của ta là tìm nghiệm của bài toán (2.15).

Đầu tiên ta xem xét bài toán với một biến, nghĩa là:

$$\max_{\psi^h\in\mathrm{span}\left\{\varphi_1,\ldots,\varphi_{n_{FE}}\right\}} \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \left|\left\langle y_j^h, \psi^h \right\rangle_{L^2(\Omega)}\right|^2 \text{ s.t. } \left\|\psi^h\right\|_{L^2(\Omega)} = 1. \tag{2.18}$$

Do $\left\{\varphi_1, \ldots, \varphi_{n_{FE}}\right\}$ là cố định, (2.18) có thể thay thế bởi:

$$\max_{\mathrm{u}_1,\ldots,\mathrm{u}_{n_{FE}}} \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \left| \left\langle y_j^h, \sum_{i=1}^{n_{FE}} \mathrm{u}_i \varphi_i \right\rangle_{L^2(\Omega)} \right|^2 \text{ s.t. } \left\| \sum_{i=1}^{n_{FE}} \mathrm{u}_i \varphi_i \right\|_{L^2(\Omega)} = 1, \quad (2.19)$$

với $\mathrm{u}_i = \mathrm{U}_{i1}$ trong (2.13). Đặt $u = \left(u_1, \ldots, u_{n_{FE}}\right)^T$, (2.19) có hàm lagrange $\mathcal{L} : \mathbb{R}^{n_{FE}} \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ cho bởi :

$$\mathcal{L}(u, \lambda) = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \left| \left\langle y_j^h, \sum_{i=1}^{n_{FE}} \mathrm{u}_i \varphi_i \right\rangle_{L^2(\Omega)} \right|^2 + \lambda \left(1 - \left\| \sum_{i=1}^{n_{FE}} \mathrm{u}_i \varphi_i \right\|_{L^2(\Omega)}^2 \right).$$

Để nhận được bài toán giá trị riêng ta tính đạo hàm của $\mathcal{L}$ theo u_i, với $i = 1, \ldots, n_{FE}$.

$$\begin{aligned}
\nabla_{u_i} \mathcal{L}(u, \lambda) =& \frac{\partial}{\partial u_i} \left(\sum_{j=1}^{n} \alpha_j \left| \sum_{k=1}^{n_{FE}} \sum_{l=1}^{n_{FE}} \left(Y_{jl}\right)^T W_{lk} u_k \right|^2 \right. \\
& \left. + \lambda \left(1 - \sum_{k=1}^{n_{FE}} \sum_{l=1}^{n_{FE}} u_l W_{lk} u_k \right) \right) \\
=& 2 \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \left(\sum_{k=1}^{n_{FE}} \sum_{l=1}^{n_{FE}} \left(Y_{jl}\right)^T W_{lk} u_k \right) \sum_{s=1}^{n_{FE}} \left(Y_{js}\right)^T W_{si} \\
& + \lambda \left(- \sum_{k=1}^{n_{FE}} W_{ik} u_k - \sum_{l=1}^{n_{FE}} u_l W_{li} \right) \\
=& 2 \sum_{k=1}^{n_{FE}} \sum_{l=1}^{n_{FE}} \sum_{s=1}^{n_{FE}} \left(W_{is} \sum_{j=1}^{n} Y_{sj} \alpha_j \left(Y^T\right)_{jl} W_{lk} u_k \right) \\
& + \lambda \left(- \sum_{k=1}^{n_{FE}} W_{ik} u_k - \sum_{l=1}^{n_{FE}} W_{il} u_l \right) \\
=& 2 \left(W Y D Y^T W u \right)_i - 2\lambda \left(W u \right)_i,
\end{aligned}$$

với $D = \operatorname{diag}(\alpha_1, \ldots \alpha_n)$ và $W = M$. Nếu ta sử dụng tích vô hướng trong H^1 thay cho tích vô hướng trong L^2, ta có $W = S$.

Do đó, điều kiện $\nabla_u \mathcal{L}(\mathrm{u}, \lambda) = 0$ dẫn đến bài toán giá trị riêng:

$$2\left(WYDY^TW\mathrm{u} - \lambda W\mathrm{u}\right) = 0,$$

hay tương đương $WYDY^TW\mathrm{u} = \lambda W\mathrm{u}$. Đặt $\bar{Y} = W^{1/2}YD^{1/2}$ và $\bar{u} = W^{1/2}\mathrm{u}$, ta có:

$$WYDY^TW\mathrm{u} = W^{1/2}W^{1/2}YD^{1/2}D^{1/2}Y^TW^{1/2}W^{1/2}\mathrm{u} = W^{1/2}\bar{Y}\bar{Y}^T\bar{u},$$

và:

$$\lambda W\mathrm{u} = \lambda W^{1/2}W^{1/2}\mathrm{u} = \lambda W^{1/2}\bar{u}.$$

Từ đó ta được:

$$W^{1/2}\bar{Y}\bar{Y}^T\bar{u} = \lambda W^{1/2}\bar{u}.$$

Nhân cả 2 vế đẳng thức trên với $W^{-1/2}$ ta được bài toán giá trị riêng của ma trận đối xứng:

$$\bar{Y}\bar{T}^T\bar{u} = \lambda\bar{u}.$$

Từ phần trước ta được kết quả cho bài toán ℓ biến $\psi_1^h, \ldots, \psi_\ell^h$. Ta được:

$$\bar{Y}\bar{Y}^T\bar{u}_i = \lambda_i\bar{u}_i \text{ với } i = 1, \ldots, \ell,$$

với $\bar{Y} = W^{1/2}YD^{1/2}$ và $\bar{u}_i = W^{1/2}\mathrm{U}_{\cdot,i}$.

Tương đương ta có thể tính vectơ riêng từ bài toán giá trị riêng:

$$\bar{Y}^T\bar{Y}\bar{v}_i = \lambda_i\bar{v}_i \text{ với } i = 1, \ldots, \ell. \tag{2.20}$$

Đặt:

$$\begin{aligned} \mathrm{U}\cdot, i = W^{-1/2}\bar{u}_i = W^{-1/2}\frac{1}{\sqrt{\lambda_i}}\bar{Y}\bar{v}_i = W^{-1/2}\frac{1}{\sqrt{\lambda_i}}W^{1/2}YD^{1/2}\bar{v}_i \\ = \frac{1}{\sqrt{\lambda_i}}YD^{1/2}\bar{v}_i, \end{aligned} \tag{2.21}$$

với $i = 1, \ldots, \ell$. Do tính đối xứng của W ta được $\bar{Y}^T\bar{Y}$ có thể viết thành:

$$\bar{Y}^T\bar{Y} = D^{1/2}Y^TW^{1/2}W^{1/2}YD^{1/2} = D^{1/2}Y^TWYD^{1/2}.$$

Do đó, để giải (2.20) và tính $U_{.,i}$ qua (2.21) ta không nhất thiết phải tính $W^{1/2}$.

Vậy khi muốn tính cơ sở POD bậc ℓ theo phương pháp số, đầu tiên ta tính snapshot bằng phương pháp phần tử hữu hạn các hệ số của hàm cơ sở phần tử hữu hạn cho mỗi snapshot tạo thành vectơ y_j là các cột của ma trận snapshot Y.

Sau khi tính tích $\bar{Y}^T\bar{Y}$, ta áp dụng (phép lặp) để giải bài toán giá trị riêng để tìm ℓ giá trị riêng $\{\lambda_i\}_{i=1}^{\ell}$ (ℓ giá trị riêng lớn nhất) cùng với các vectơ riêng tương ứng của nó $\bar{v}_i$. Từ (2.21) ta tìm các vectơ U$_{.,i}, i = 1, \ldots, \ell$. Khi đó cơ sở POD bậc ℓ, $\psi_1^h, \ldots \psi_\ell^h$ sẽ được tính bởi (2.13).

2.4 Phương pháp POD-Galerkin cho bài toán biên Robin

Tổng hợp lại để tìm cơ sở POD ta chọn trọng hình thang:

$$\alpha_1 = \alpha_n = \frac{\delta q}{2} \text{ và } \alpha_i = \delta q, \text{ với } i = 2, ..., n-1,$$

với $\delta q = \frac{q_u - q_l}{n-1}$. Sau đó ta giải bài toán giá trị riêng:

$$D^{1/2}Y^TWYD^{1/2}\bar{v}_i = \lambda_i\bar{v}_i. \tag{2.22}$$

Ta tính ℓ giá trị riêng lớn nhất $\lambda_1, ...\lambda_\ell$ và ℓ vectơ riêng tương ứng $\bar{v}_1, ..., \bar{v}_\ell$, sau đó tính vectơ hệ số $U_{.,i}$ với mỗi hàm cơ sở POD ψ_i với $i = 1, 2, ..., \ell$ khi biểu diễn qua cơ sở phần tử hữu hạn bởi công thức:

$$U_{.,i} = \frac{1}{\sqrt{\lambda_i}}YD^{1/2}\bar{v}_i. \tag{2.23}$$

Khi đó ℓ hàm cơ sở POD xác định bởi:

$$\psi_i(x) = \sum_{j=1}^{n_{FE}} U_{ji}\varphi_j(x) \text{ với } i = 1, ..., \ell. \tag{2.24}$$

Sau khi tính ℓ cơ sở POD như đã mô tả ở trên ta có nghiệm POD $u^\ell \in V^\ell = \text{span}\{\psi_i\}_{i=1}^{\ell} \subset H^1(\Omega)$ được cho bởi:

$$u^\ell(x) = \sum_{i=1}^{\ell} u_i^\ell \psi_i(x). \tag{2.25}$$

thỏa mãn:

$$B\left(u^\ell, v^\ell; q\right) = \left\langle F, v^\ell \right\rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)} \text{ với mọi } v^\ell \in V^\ell \text{ và } q \in \mathcal{I}.$$

Đặc biệt,

$$B\left(u^\ell, \psi_j; q\right) = \left\langle F, \psi_j \right\rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)}, \tag{2.26}$$

với $j = 1, \ldots, \ell$ và $q \in \mathcal{I}$.

Tương tự như phương pháp phần tử hữu hạn, ta thế (2.25) vào (2.26) ta được:

$$\sum_{i=1}^{\ell} B\left(\psi_i, \psi_j; q\right) \mathrm{u}_i^\ell = \left\langle F, \psi_j \right\rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)}, 1 \le j \le \ell.$$

Ta được hệ phương trình tuyến tính:

$$\left(\mathrm{B}^\ell\right)^T \mathrm{u}^\ell = \mathrm{F}^\ell, \tag{2.27}$$

với $\mathrm{B}_{ij}^\ell = B\left(\psi_i, \psi_j; q\right), \mathrm{B}^\ell = \left(\left(\mathrm{B}_{ij}^\ell\right)\right) \in \mathbb{R}^{\ell \times \ell}, \mathrm{F}_j^\ell = \left\langle F, \psi_j \right\rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)}$, $\mathrm{F}^\ell = \left(\mathrm{F}_j^\ell\right) \in \mathbb{R}^\ell$, và $\mathrm{u}^\ell = \left(\mathrm{u}_j^\ell\right) \in \mathbb{R}^\ell$. Giải hệ tuyến tính này ta nhận được nghiệm POD u^ℓ cho bởi (2.25).

Nhận xét 2.6. Chú ý :

$$\begin{aligned}
\mathrm{B}_{ik}^{\ell} &= B\left(\psi_i, \psi_k; q\right) = B\left(\sum_{j=1}^{n_{FE}} \mathrm{U}_{ji}\varphi_j, \sum_{l=1}^{n_{FE}} \mathrm{U}_{lk}\varphi_l; q\right) \\
&= \sum_{j=1}^{n_{FE}}\sum_{l=1}^{n_{FE}} \left(\mathrm{U}^T\right)_{ij} B\left(\varphi_j, \varphi_l; q\right) \mathrm{U}_{lk} = \sum_{j=1}^{n_{FE}}\sum_{l=1}^{n_{FE}} \left(\mathrm{U}^T\right)_{ij} \mathrm{B}_{jl}\mathrm{U}_{lk} \\
&= \left(\mathrm{U}^T\mathrm{B}\mathrm{U}\right)_{ik},
\end{aligned}$$

và:

$$\begin{aligned}
\mathrm{F}_{k}^{\ell} &= \langle F, \psi_k\rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)} = \left\langle F, \sum_{j=1}^{n_{FE}} \mathrm{U}_{jk}\varphi_j \right\rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)} \\
&= \sum_{j=1}^{n_{FE}} \mathrm{U}_{jk} \left\langle F, \varphi_j\right\rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)} = \sum_{j=1}^{n_{FE}} \left(\mathrm{U}^T\right)_{kj} \mathrm{F}_j = \left(\mathrm{U}^T\, \mathrm{F}\right)_k .
\end{aligned}$$

Do đó $\mathrm{B}^{\ell} = \mathrm{U}^T\mathrm{B}\mathrm{U}$ và $\mathrm{F}^{\ell} = \mathrm{U}^T\,\mathrm{F}$, với $\mathrm{B} = \left(\left(\mathrm{B}_{ij}\right)\right) \in \mathbb{R}^{n_{FE}\times n_{FE}}$ và $\mathrm{F} = \left(\mathrm{F}_j\right) \in \mathbb{R}^{n_{FE}}$ được cho trong (2.11) và (2.12).

2.5 Ước lượng sai số của phương pháp POD-Galerkin

Cho $q \in \mathcal{I}$, $B(\cdot,\cdot;q)$ được cho bởi (2.6) và F cho bởi (2.3), $\{\psi_i\}_{i=1}^{\ell}$ là cơ sở POD được tính như đã đưa ra ở phần trước. Ta sẽ đưa ra ước lượng sai số giữa nghiệm $u = u(q)$ của phương trình:

$$B(u, \phi; q) = \langle F, \phi\rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)} \text{ với mọi } \phi \in H^1(\Omega), \tag{2.28}$$

và nghiệm POD tương ứng $u^{\ell} = u^{\ell}(q) \in V^{\ell} = \operatorname{span}\{\psi_i\}_{i=1}^{\ell}$ của phương trình

$$B\left(u^{\ell}, \phi; q\right) = \langle F, \phi\rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)} \text{ với mọi } \phi \in V^{\ell}. \tag{2.29}$$

Định nghĩa 2.7. Với $u, v \in H^1(\Omega)$ ta định nghĩa tích vô hướng $\langle \cdot, \cdot \rangle_{H^1_\Gamma(\Omega)}$ với $c, \sigma > 0$ bởi:

$$\langle u, v \rangle_{H^1_\Gamma(\Omega)} = c \int_\Omega \nabla u \cdot \nabla v \, \mathrm{d}x + \sigma \int_\Gamma uv \, \mathrm{d}s,$$

và chuẩn của nó $\| \cdot \|_{H^1_\Gamma(\Omega)}$ bởi:

$$\|u\|_{H^1_\Gamma(\Omega)} = \sqrt{\langle u, u \rangle_{H^1_\Gamma(\Omega)}},$$

với mọi $u \in H^1(\Omega)$.

Do $\| \cdot \|_{H^1_\Gamma(\Omega)}$ tương đương với $\| \cdot \|_{H^1(\Omega)}$ trong $H^1(\Omega)$, do đó tồn tại hằng số $c_{H^1} > 0$ thỏa mãn:

$$\|u\|_{H^1(\Omega)} \le c_{H^1} \|u\|_{H^1_\Gamma(\Omega)} \text{ với mọi } u \in H^1(\Omega). \tag{2.30}$$

Vì $H^1(\Omega)$ là nhúng liên tục trong $L^2(\Omega)$, tồn tại hằng số $c_{L^2} > 0$ thỏa mãn:

$$\|u\|_{L^2(\Omega)} \le c_{L^2} \|u\|_{H^1(\Omega)} \text{ với mọi } u \in H^1(\Omega). \tag{2.31}$$

Từ bất đẳng thức (2.30) và (2.31) suy ra bất đẳng thức Poincaré:

$$\|u\|_{L^2(\Omega)} \le c_V \|u\|_{H^1_\Gamma(\Omega)} \text{ với mọi } u \in H^1(\Omega),$$

với $c_V = c_{L^2} c_{H^1} > 0$. Để đơn giản ta giả sử tham số β bằng 0 trong phương trình elliptic. Khi $\beta \neq 0$ các chứng minh cũng hoàn toàn tương tự. Khi đó dạng song tuyến tính có thể viết lại như sau:

$$B(u, \phi; q) = \langle u, \phi \rangle_{H^1_\Gamma(\Omega)} + q \langle u, \phi \rangle_{L^2(\Omega)}, \tag{2.32}$$

với $u, \phi \in H^1(\Omega)$ and $q \in \mathcal{I}$.

Bây giờ ta sẽ ước lượng sai số giữa nghiệm $u = u(q)$ của (2.28) và nghiệm theo POD $u^\ell(q)$ của (2.29) với $q \in \mathcal{I}$. Trước hết ta xét trường hợp ta biết nghiệm yếu $u(q)$ trên cả lưới $\mathcal{I} = [q_l, q_u]$ khi đó ta có phiên bản liên tục POD.

Mệnh đề 2.8. *Sai số giữa nghiệm $u = u(q)$ của (2.28) và nghiệm theo POD $u^\ell(q)$ của (2.29) với $q \in \mathcal{I}$ có thể ước lượng bởi:*

$$\int_{\mathcal{I}} \left\| u(q) - u^\ell(q) \right\|^2_{H^1(\Omega)} \,\mathrm{d}q \le C_{cont} \sum_{i=\ell+1}^{\infty} \lambda_i,$$

với $C_{cont} > 0$ là hằng số chỉ phụ thuộc vào $q_l, q_u, \alpha_1(q_u)$ và $\alpha_2(q_l)$.

Chứng minh. Để đơn giản ta kí hiệu $V = H^1(\Omega)$. Xét toán tử chiếu $\mathcal{P}^\ell : V \to V^\ell$ cho bởi:

$$\mathcal{P}^\ell \varphi = \sum_{i=1}^{\ell} \langle \varphi, \psi_i \rangle_V \psi_i \quad \text{, với mọi } \varphi \in V.$$

Từ trường hợp liên tục của POD ta có:

$$\int_{\mathcal{I}} \left\| u(q) - \mathcal{P}^\ell u(q) \right\|^2_V \,\mathrm{d}q = \sum_{i=\ell+1}^{\infty} \lambda_i.$$

Ta viết lại:

$$u^\ell(q) - u(q) = u^\ell(q) - \mathcal{P}^\ell u(q) + \mathcal{P}^\ell u(q) - u(q) = \vartheta^\ell(q) + \varrho^\ell(q),$$

với $\vartheta^\ell(q) = u^\ell(q) - \mathcal{P}^\ell u(q)$ và $\varrho^\ell(q) = \mathcal{P}^\ell u(q) - u(q)$. Ta có:

$$\int_{\mathcal{I}} \left\| \varrho^\ell(q) \right\|^2_V \,\mathrm{d}q = \sum_{i=\ell+1}^{\infty} \lambda_i. \tag{2.33}$$

Ta đánh giá $\vartheta^\ell(q) \in V^\ell$. Từ (2.28) và (2.29) ta có:

$$\begin{aligned}
B\left(\vartheta^\ell(q), \psi; q\right) &= \left\langle u^\ell(q), \psi \right\rangle_{H^1_\Gamma(\Omega)} + q \left\langle u^\ell(q), \psi \right\rangle_{L^2(\Omega)} \\
&\quad - \langle \mathcal{P}^\ell u(q), \psi \rangle_{H^1_\Gamma(\Omega)} - q \left\langle \mathcal{P}^\ell u(q), \psi \right\rangle_{L^2(\Omega)} \\
&= \langle F, \psi \rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)} - \langle \mathcal{P}^\ell u(q), \psi \rangle_{H^1_\Gamma(\Omega)} \\
&\quad - q \left\langle \mathcal{P}^\ell u(q), \psi \right\rangle_{L^2(\Omega)} \\
&= B\left(u(q), \psi, q\right) - B\left(\mathcal{P}^\ell u(q), \psi, q\right) \\
&= -B\left(\varrho^\ell(q), \psi, q\right).
\end{aligned}$$

Chọn $\psi = \vartheta^\ell(q)$ theo chứng minh của mệnh đề (2.3) ta có:

$$\begin{aligned} \alpha_2(q) \left\| \vartheta^\ell(q) \right\|_V^2 &\le \left| B\left(\vartheta^\ell(q), \vartheta^\ell(q); q\right) \right| = \left| B\left(\varrho^\ell(q), \psi, q\right) \right| \\ &\le \alpha_1(q) \left\| \varrho^\ell(q) \right\|_V \left\| \vartheta^\ell(q) \right\|_V . \end{aligned} \tag{2.34}$$

Do đó ta có:

$$\left\| \vartheta^\ell(q) \right\|_V^2 \le \frac{\alpha_1(q)^2}{\alpha_2(q)^2} \left\| \varrho^\ell(q) \right\|_V^2 \le \frac{\alpha_1(q_u)^2}{\alpha_2(q_l)^2} \left\| \varrho^\ell(q) \right\|_V^2 , \tag{2.35}$$

vì $\alpha_1(q) \le \alpha_1(q_u)$ và $\alpha_2(q) \ge \alpha_2(q_l)$. Ta có:

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{I}} \left\| u^\ell(q) - u(q) \right\|_V^2 \, \mathrm{d}q &\le 2 \int_{\mathcal{I}} \left\| \vartheta^\ell(q) \right\|_V^2 + \left\| \varrho^\ell(q) \right\|_V^2 \, \mathrm{d}q \\ &\le 2 \int_{\mathcal{I}} \left(\frac{\alpha_1(q_u)^2}{\alpha_2(q_l)^2} + 1 \right) \left\| \varrho^\ell(q) \right\|_V^2 \, \mathrm{d}q. \end{aligned}$$

Kết hợp với (2.33) ta được điều cần chứng minh. □

Ta thấy, sai số giữa nghiệm yếu $u = u(q)$ của (2.28) và nghiệm theo POD $u = u^\ell(q)$ của (2.29) với $q \in \mathcal{I}$ có thể ước lượng bằng tổng các giá trị riêng mà các vectơ riêng tương ứng ta không dùng để mô hình. Do đó nếu các giá trị riêng $\{\lambda_i\}_{i=1}^\infty$ giảm rất nhanh, ta được u^ℓ sẽ rất gần u với giá trị nhỏ của ℓ.

Tiếp theo ta đi đến trường hợp ta thường dùng trong phương pháp số hơn, với các snapshot được cho trên một lưới rời rạc $\{q_i\}_{i=1}^n \subset \mathcal{I}$. Điều này tương đương với việc tìm cơ sở POD ta đưa ra ở phần trước, với số cột của ma trận Y là n. Giả sử ta có $0 < q_l < q_u$ ta lấy bước lưới không đổi trên $[q_l, q_u]$ với $n > 1$ là số điểm lưới với bước lưới δq cho bởi:

$$q_i = q_l + (i-1)\delta q \text{ với } i \in \{1, \dots, n\}, \text{ và } \delta q := \frac{q_u - q_l}{n-1}. \tag{2.36}$$

Giá trị riêng của bài toán (2.20) phụ thuộc vào lưới (2.36) ta kí hiệu bởi λ_i^n với $i = 1, \dots, d^n$, với d^n là hạng của ma trận $\bar{Y}^T \bar{Y}$ trong (2.20). Khi đó cơ sở POD $\psi_1^h, \ldots, \psi_\ell^h$ được tính bởi (2.13), với các vectơ $\mathrm{U}_{.,i}$ được tính cho $i = 1, \ldots, \ell$ qua (2.20) và (2.21) .

Mệnh đề 2.9. *Sai số giữa nghiệm $u = u\left(q_i\right)$ của (2.28) và nghiệm theo POD $u^\ell\left(q_i\right)$ của (2.29) với q_i cho bởi (2.36) có thể ước lượng bởi:*

$$\sum_{j=1}^{n} \alpha_j \left\| u\left(q_j\right) - u^\ell\left(q_j\right) \right\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq C_{\text{disc}} \sum_{i=\ell+1}^{d^n} \lambda_i^n,$$

với $C_{\text{disc}} > 0$ chỉ phụ thuộc vào các hằng số $q_l, q_u, \alpha_1(q_u), \alpha_2\left(q_l\right)$. Khác với trường hợp snapshot liên tục hạng d^n của ma trận $\bar{Y}^T\bar{Y}$ và giá trị riêng của nó $\lambda_i^n, i = 1, \ldots, d^n$ phụ thuộc vào việc chọn lưới trong (2.36) để tính toán cơ sở POD.

Chứng minh. Mệnh đề được chứng minh tương tự mệnh đề trước. Thay vì (2.33) và (2.35) ta có:

$$\sum_{j=1}^{n} \alpha_j \left\| \varrho^\ell(q_j) \right\|_V^2 = \sum_{i=\ell+1}^{\infty} \lambda_i^n,$$

và

$$\left\| \vartheta^\ell(q_j) \right\|_V^2 \leq \frac{\alpha_1(q_j)^2}{\alpha_2(q_l)^2} \left\| \varrho^\ell(q_j) \right\|_V^2.$$

□

Như trước đó, sai số giữa $u = u\left(q_i\right)$ của (2.28) và nghiệm $u^\ell\left(q_i\right)$ của (2.29) với q_i cho bởi (2.36) có thể ước lượng bằng tổng các giá trị riêng mà các vectơ riêng tương ứng ta không dùng để mô hình. Như ở phần giới thiệu về phương pháp POD ta biết giá trị riêng λ_i^n của ma trận $\bar{Y}^T\bar{Y}$ sẽ hội tụ tới giá trị riêng λ_i với $1 \leq i \leq \ell$ (với ℓ cố định). Do đó, hai ước lượng sai số (trường hợp liên tục và rời rạc) có quan hệ mật thiết.

Ta kí hiệu $V = H^1(\Omega)$. Giả sử ta có 2 lưới $\left\{q_j\right\}_{j=1}^{n}$ và $\{\bar{q}_k\}_{k=1}^{m}$ thuộc $\mathcal{I}$ thỏa mãn:

$$q_l = q_1 < q_2 < \ldots < q_n = q_u, \quad q_l = \bar{q}_1 < \bar{q}_2 < \ldots < \bar{q}_m = q_u. \quad (2.37)$$

Ta đặt:

$$\delta q_j = q_j - q_{j-1}, j = 2, \ldots, n,\ \delta q = \min_{2 \le j \le n} \delta q_j,\ \Delta q = \max_{2 \le j \le n} \delta q_j,$$

$$\delta \bar{q}_k = \bar{q}_k - \bar{q}_{k-1}, k = 2, \ldots, m,\ \delta \bar{q} = \min_{2 \le k \le m} \delta \bar{q}_k,\ \Delta \bar{q} = \max_{2 \le k \le m} \delta \bar{q}_k,$$

và:

$$\alpha_1 = \tfrac{\delta q_2}{2},\ \ \alpha_j = \tfrac{\delta q_j + \delta q_{j+1}}{2} \text{ , với } 2 \le j \le n-1, \quad \alpha_n = \tfrac{\delta q_n}{2},$$
$$\beta_1 = \tfrac{\delta \bar{q}_2}{2},\ \ \beta_k = \tfrac{\delta \bar{q}_k + \delta \bar{q}_{k+1}}{2} \text{ , với } 2 \le k \le m-1, \quad \beta_m = \tfrac{\delta \bar{q}_m}{2}.$$

Mục tiêu của ta là đánh giá:

$$\sum_{k=1}^{m} \beta_k \left\| u\left(\bar{q}_k\right) - u^{\ell}\left(\bar{q}_k\right) \right\|_V^2,$$

với cơ sở POD bậc ℓ được tính bằng cách sử dụng $\left\{u\left(q_j\right)\right\}_{j=1}^{n}$ phụ thuộc vào lưới $\left\{q_j\right\}_{j=1}^{n}$. Với $\bar{q}_k \in \mathcal{I}, k \in \{1, \ldots, m\}$, cho trước khi đó tồn tại chỉ số $j_k \in \{1, \ldots, n-1\}$ sao cho:

$$q_{j_k} \le \bar{q}_k \le q_{j_k+1}.$$

Ta định nghĩa $\sigma_m \in \{1, \ldots, m\}$ là số lần xuất hiện tối đa của chỉ số j_k ứng với k trong khoảng $1 \le k \le m$. Chú ý:

$$\max\left\{\left|\bar{q}_k - q_{j_k+1}\right|, \left|\bar{q}_k - q_{j_k}\right|\right\} \le \delta q_{j_k+1} \le \Delta q.$$

Với mọi $k \in \{1, \ldots, m\}$ ta có thể viết $u\left(\bar{q}_k\right) - u^{\ell}\left(\bar{q}_k\right)$ như sau:

$$\left(u\left(\bar{q}_k\right) - u^{\ell}\left(\bar{q}_k\right) = u\left(\bar{q}_k\right) - u\left(q_{j_k}\right) + u\left(q_{j_k}\right) - u^{\ell}\left(q_{j_k}\right) + u^{\ell}\left(q_{j_k}\right) - u^{\ell}\left(\bar{q}_k\right). \quad (2.38)$$

Vì q_{j_k} thuộc lưới, điểm mà ta sẽ tính snapshot, ta sẽ đánh giá sự sai khác $u\left(q_{j_k}\right) - u^{\ell}\left(q_{j_k}\right)$. Ta có:

$$\begin{aligned} B\left(u\left(\bar{q}_k\right), \varphi; \bar{q}_k\right) &= \langle F, \varphi\rangle_{V',V} \quad \text{, với mọi } \varphi \in V, \\ B\left(u\left(q_{j_k}\right), \varphi; q_{j_k}\right) &= \langle F, \varphi\rangle_{V',V} \quad \text{, với mọi } \varphi \in V. \end{aligned}$$

Trừ theo vế hai phương trình ta được:

$$\left\langle u\left(\bar{q}_k\right) - u\left(q_{j_k}\right), \varphi\right\rangle_{H^1_\Gamma(\Omega)} + \bar{q}_k \left\langle u\left(\bar{q}_k\right), \varphi\right\rangle_{L^2(\Omega)} - q_{j_k}\left\langle u\left(q_{j_k}\right), \varphi\right\rangle_{L^2(\Omega)} = 0,$$

với mọi $\varphi \in V$. Từ đó ta có:

$$B\left(u\left(\bar{q}_k\right) - u\left(q_{j_k}\right), \varphi; \bar{q}_k\right) = \left(q_{j_k} - \bar{q}_k\right)\left\langle u\left(q_{j_k}\right), \varphi\right\rangle_{L^2(\Omega)}.$$

Chọn $\varphi = u\left(\bar{q}_k\right) - u\left(q_{j_k}\right)$ áp dụng bất đẳng thức Young và (2.31) ta có:

$$\begin{aligned} &\left\|u\left(\bar{q}_k\right) - u\left(q_{j_k}\right)\right\|^2_{H^1_\Gamma(\Omega)} + \bar{q}_k\left\|u\left(\bar{q}_k\right) - u\left(q_{j_k}\right)\right\|^2_{L^2(\Omega)} \\ &\leq \left|q_{j_k} - \bar{q}_k\right| \left\|u\left(q_{j_k}\right)\right\|_{L^2(\Omega)} \left\|u\left(\bar{q}_k\right) - u\left(q_{j_k}\right)\right\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq \delta q_{j_k+1}\left\|u\left(q_{j_k}\right)\right\|_{L^2(\Omega)} \left\|u\left(\bar{q}_k\right) - u\left(q_{j_k}\right)\right\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq \frac{c^2_{L^2}\delta q^2_{j_k+1}}{2\alpha_2(q_l)}\left\|u\left(q_{j_k}\right)\right\|^2_{L^2(\Omega)} + \frac{\alpha_2(q_l)}{2}\left\|u\left(\bar{q}_k\right) - u\left(q_{j_k}\right)\right\|^2_V. \end{aligned}$$

Do đó ta có:

$$\begin{aligned} &\alpha_2(q_l)\left\|u\left(\bar{q}_k\right) - u\left(q_{j_k}\right)\right\|^2_V \leq B\left(u\left(\bar{q}_k\right) - u\left(q_{j_k}\right), u\left(\bar{q}_k\right) - u\left(q_{j_k}\right); \bar{q}_k\right) \\ &\leq \frac{c^2_{L^2}\delta q^2_{j_k+1}}{2\alpha_2(q_l)}\left\|u\left(q_{j_k}\right)\right\|^2_{L^2(\Omega)} + \frac{\alpha_2(q_l)}{2}\left\|u\left(\bar{q}_k\right) - u\left(q_{j_k}\right)\right\|^2_V. \end{aligned}$$

Từ đó ta có:

$$\left\|u\left(\bar{q}_k\right) - u\left(q_{j_k}\right)\right\|^2_V \leq \frac{c^4_{L^2}}{\alpha_2(q_l)^2}\delta q^2_{j_k+1}\|F\|^2_{V'}. \tag{2.39}$$

Tương tự ta có :

$$\left\|u^{\ell}\left(\bar{q}_k\right) - u^{\ell}\left(q_{j_k}\right)\right\|^2_V \leq \frac{c^4_{L^2}}{\alpha_2(q_l)^2}\delta q^2_{j_k+1}\|F\|^2_{V'}. \tag{2.40}$$

Chú ý: $\beta_k \leq \Delta\bar{q}, 1 \leq k \leq m$, và $\alpha_j \geq \delta q/2, 1 \leq j \leq n$. Do đó:

$$\beta_k \leq \frac{2\alpha_j \Delta\bar{q}}{\delta q} \text{ với } 1 \leq k \leq m \text{ và } 1 \leq j \leq n.$$

Đặt $C_1 = 4c_{L^2}^4 \|F\|_{V'}^2/\alpha_2(q_l)^2 > 0$. Từ $\sum_{k=1}^m \beta_k = q_u - q_l$, (2.38), (2.39) và (2.40) ta có:

$$\begin{aligned}
&\sum_{k=1}^{m} \beta_k \left\| u\left(\bar{q}_k\right) - u^{\ell}\left(\bar{q}_k\right) \right\|_V^2 \\
&\quad \leq 2 \sum_{k=1}^{m} \beta_k \left\| u\left(q_{j_k}\right) - u^{\ell}\left(q_{j_k}\right) \right\|_V^2 + C_1 \sum_{k=1}^{m} \beta_k \delta q_{j_k+1}^2 \\
&\quad \leq \frac{4\sigma_m \Delta\bar{q}}{\delta q} \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \left\| u\left(q_j\right) - u^{\ell}\left(q_j\right) \right\|_V^2 + C_1 \left(q_u - q_l\right) \Delta q^2.
\end{aligned}$$

Từ đó ta được:

$$\sum_{k=1}^{m} \beta_k \left\| u\left(\bar{q}_k\right) - u^{\ell}\left(\bar{q}_k\right) \right\|_V^2 \leq \frac{4\sigma_m \Delta\bar{q}}{\delta q} \sum_{i=\ell+1}^{d^n} \lambda_i^n + C_2 \Delta q^2,$$

với $C_2 = \left(q_u - q_l\right) C_1 > 0$.

Từ các lí luận trên ta có định lí sau:

Định lí 2.10. *Giả sử ta có 2 lưới $\left\{q_j\right\}_{j=1}^n$ và $\left\{\bar{q}_k\right\}_{k=1}^m$ trong khoảng $\mathcal{I}$ thỏa mãn (2.37). Với $\bar{q}_k, 1 \leq k \leq m$, kí hiệu $u\left(\bar{q}_k\right)$ và $u^{\ell}\left(\bar{q}_k\right)$ là nghiệm của phương trình (2.28) và (2.29). Khi đó tồn tại hằng số $C > 0$ phụ thuộc vào q_l, q_u, c_{L^2}, nhưng không phụ thuộc vào lưới thỏa mãn:*

$$\sum_{k=1}^{m} \beta_k \left\| u^{\ell}\left(\bar{q}_k\right) - u\left(\bar{q}_k\right) \right\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq C \left(\frac{\sigma_m \Delta\bar{q}}{\delta q} \sum_{i=\ell+1}^{d^n} \lambda_i^n + \Delta q^2 \right).$$

2.6 Ví dụ số

Trong phần này ta sẽ đưa ra ví dụ số để minh họa kết quả nhận được. Chương trình được lập trình thông qua thư viện Fenics của Python là một thư viện để giải phương trình đạo hàm riêng bằng phương pháp phần tử hữu hạn.

Ta lấy miền $\Omega = (0,1) \times (0,1) \subset \mathbb{R}^2$, chọn $c = 0.75$, $\beta = (1,1)^T$, $f(x) = x_1$, $\sigma = 1.5$, và $g(x) = -1$. Để nhận được các snapshots $\{y_j\}_{j=1}^n$ ta sử dụng phương pháp phần tử hữu hạn với lưới cách đều trên hình chữ nhật với kích thước lưới $h = 1/50$. Khi đó, rời rạc phần tử hữu hạn của ta có 2601 bậc tự do. Ta chọn các hàm cơ sở phần tử hữu hạn là những hàm tuyến tính từng khúc $\{\varphi_i\}_{i=1}^{n_{FE}}$ với $n_{FE} = 2601$. Lấy $q_l = 0.5$, $q_u = 50.5$ và $\delta q = 1$, ta nhận được 51 snapshot $y_i = Y_{.,i}$ với $i = 1, ..., 51$, ở đó $Y \in \mathbb{R}^{n_{FE} \times 51}$ là ma trận hệ số thỏa mãn:

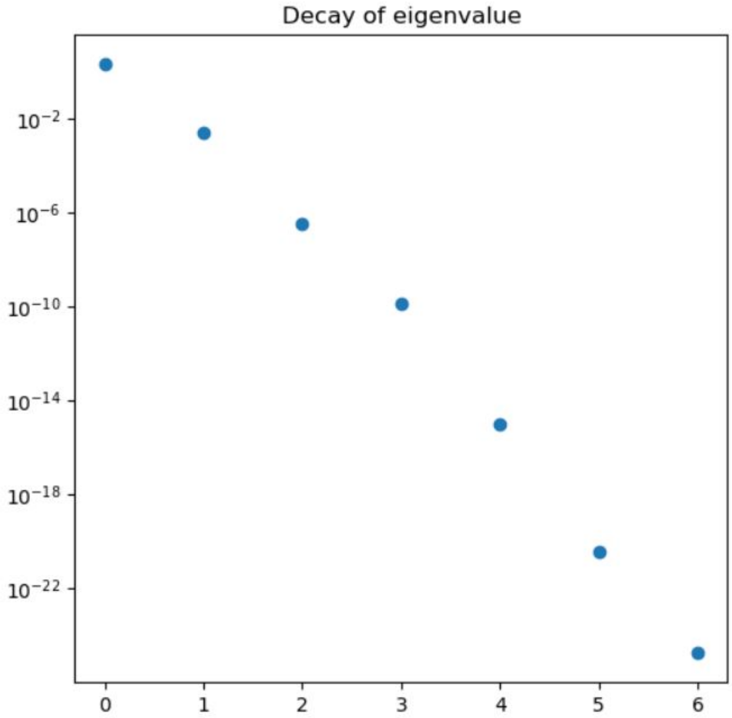
$$u^h(q_i) = \sum_{i=1}^{n_{FE}} Y_{ij}\varphi_i$$

với tham số $\{q_i\}_{i=1}^{51}$. Sau đó ta xác định $\ell = 7$ hàm cơ sở POD bằng cách áp dụng (2.22) với ma trận trọng $M = W$, sau đó sử dụng (2.23) và (2.24). Hình 2.1 minh họa tốc độ giảm của các giá trị riêng. Sau đó nghiệm POD được cho bởi (2.25), với vectơ hệ số u^ℓ là nghiệm duy nhất của (2.27).

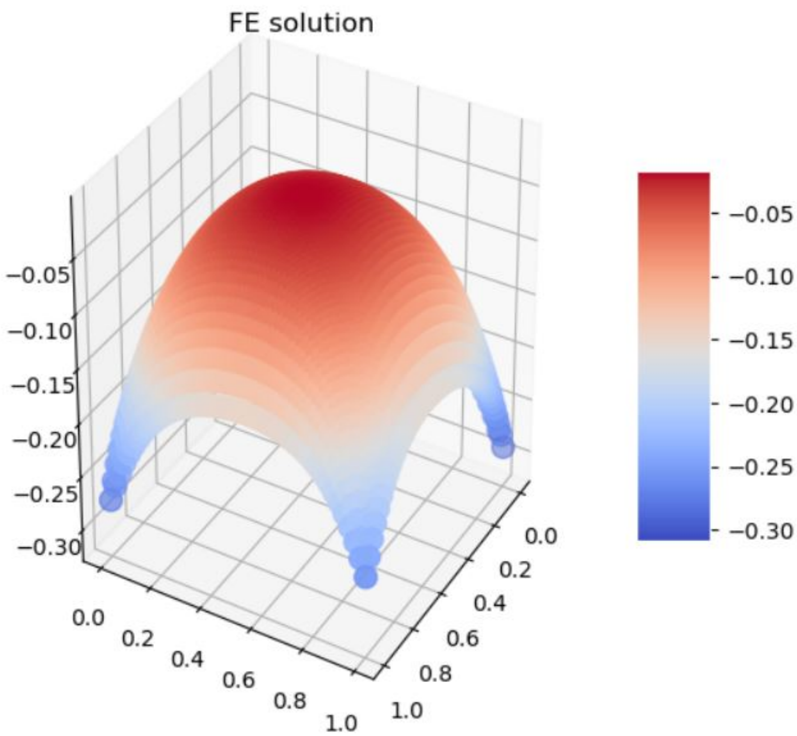
Với $q = 25$, ta được nghiệm khi giải bằng phương pháp phần tử hữu hạn được minh họa trong hình 2.2 và nghiệm khi giải theo phương pháp POD được minh họa trong hình 2.3. Sai khác giữa hai nghiệm được minh họa trong hình 2.4. Về mặt kết quả số, sai số giữa nghiệm theo hai phương pháp là:

$$||u^h - u^\ell||_{L^2(\Omega)} \approx 3.2233 \times 10^{-9},$$

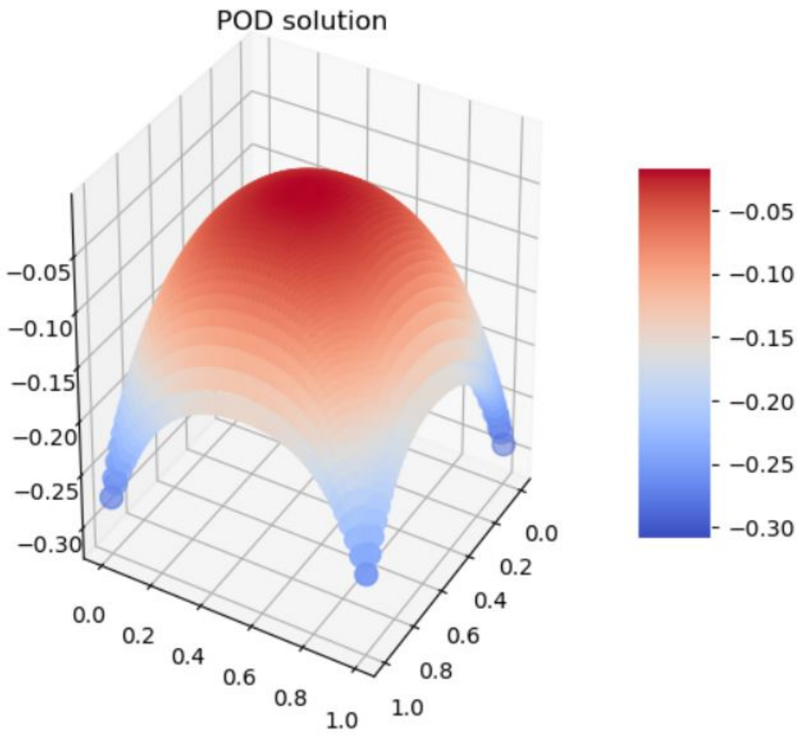
$$||u^h - u^\ell||_{H^1(\Omega)} \approx 3.0345 \times 10^{-8}.$$



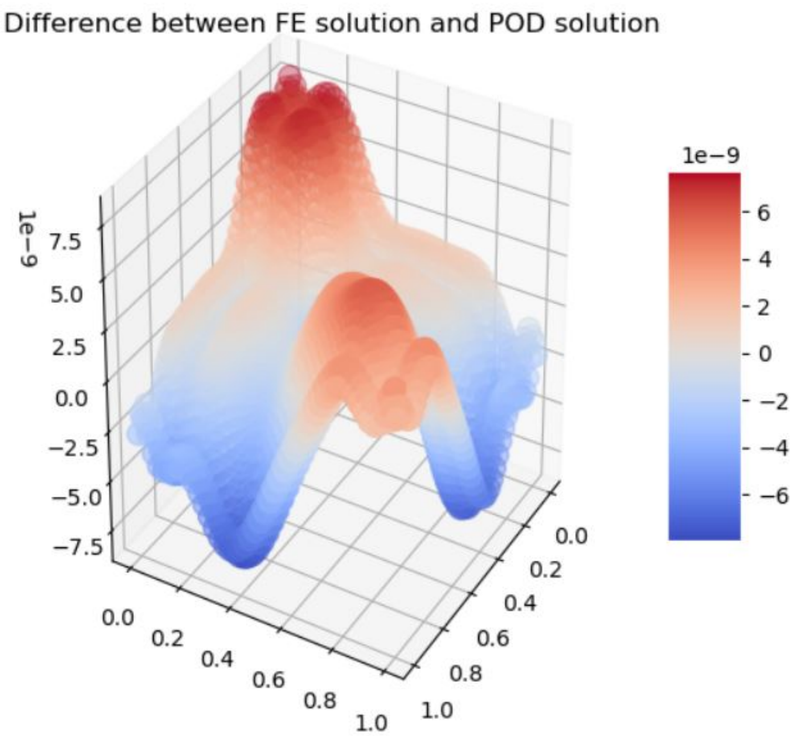
Hình 2.1: Tốc độ giảm của các giá trị riêng



Hình 2.2: Nghiệm theo phương pháp phần tử hữu hạn



Hình 2.3: Nghiệm theo phương pháp POD



Hình 2.4: Sai khác giữa nghiệm theo hai phương pháp

Chương 3

ƯỚC LƯỢNG THAM SỐ CHO PHƯƠNG TRÌNH ELLIPTIC

Trong phần này ta áp dụng phương pháp POD cho bài toán ước lượng tham số trong phương trình elliptic. Mục đích là ước lượng tham số vô hướng của phương trình elliptic từ các đo đạc trên biên.

Xác định tham số vô hướng q trong phương trình:

$$-c\Delta u + \beta \cdot \nabla u + qu = f \qquad \text{trong } \Omega, \tag{3.1}$$

$$c\frac{\partial u}{\partial n} + \sigma u = g \qquad \text{trên } \Gamma = \partial\Omega. \tag{3.2}$$

từ giá trị của u trên biên Γ. Trong (3.1)-(3.2), $c > 0$, $\beta \in \mathbb{R}^d$, $\sigma \in \mathbb{R}$ là các tham số đã biết, còn f và g là các hàm đã cho.

3.1 Đặt bài toán

Xét toán tử e: $\mathbb{R} \times H^1(\Omega) \to H^1(\Omega)'$ cho bởi:

$$\begin{aligned}\langle e(q,u), \varphi\rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)} = &\int_\Omega c\nabla u \cdot \nabla\varphi \mathrm{d}x + \int_\Omega \beta \cdot \nabla u\varphi \mathrm{d}x + \int_\Omega qu\varphi \mathrm{d}x \\ &- \int_\Omega f\varphi \mathrm{d}x + \int_\Gamma \sigma u\varphi \mathrm{d}s - \int_\Gamma g\varphi \mathrm{d}s,\end{aligned}$$

với $(q,u) \in \mathbb{R} \times H^1(\Omega), \varphi \in H^1(\Omega)$. Chú ý rằng:

$$e(q,u) = B(u,\cdot;q) - F \in H^1(\Omega)',$$

với B cho trong (2.6) và F cho trong (2.3).

Để xác định q ta sẽ sử dụng phương pháp bình phương tối thiểu kết hợp với chỉnh Tikhonov. Ta định nghĩa hàm chi phí $J : \mathbb{R} \times H^1(\Omega) \to \mathbb{R}$ cho bởi:

$$J(q,u) = \frac{\alpha}{2} \int_\Gamma |u - u_\Gamma|^2 \, \mathrm{d}s + \frac{\kappa}{2} |q - q_d|^2, \tag{3.3}$$

với giá trị $\alpha > 0$ và $\kappa > 0$ được hiểu là các trọng hoặc các tham số chỉnh hóa. Giá trị vô hướng q_d là một ước lượng tiên nghiệm có thể có cho tham số q . Nếu ta không có ước lượng nào thì ta lấy q_d bằng 0. Hàm $u_\Gamma \in L^2(\Gamma)$ biểu diễn dữ liệu được cho của u trên biên Γ. Phép đo này có thể chỉ được lấy trên một lưới của Γ trong thực hành.

Nhận xét 3.1. Trong nhiều trường hợp ta có thể có phép đo cho u trong cả miền Ω (không chỉ ở trên biên Γ) hoặc thậm chí là phép đo cho gradient của u trong miền Ω. Tổng quát hơn, hàm chi phí của ta có thể mở rộng như sau:

$$\begin{aligned}\hat{J}(q,u) =& \frac{\alpha_1}{2} \int_\Omega |u - u_\Omega|^2 \, \mathrm{d}x + \frac{\alpha_2}{2} \int_\Omega |\nabla u - v_\Omega|^2 \, \mathrm{d}x + \frac{\alpha_3}{2} \int_\Gamma |u - u_\Gamma|^2 \, \mathrm{d}s \\ &+ \frac{\kappa}{2} |q - q_d|^2,\end{aligned}$$

với $u_\Omega \in L^2(\Omega), v_\Omega \in L^2(\Omega)^d, \alpha_1 \geq 0, \alpha_2 \geq 0, \alpha_3 \geq 0$, và $\kappa > 0$. Ở đây ta tập trung vào trường hợp: $\alpha_1 = \alpha_2 = 0$ và $\alpha_3 =: \alpha > 0$.

Sử dụng các kí hiệu ở trên ta có bài toán tối ưu sau:

$$\min J(q,u) \text{ s.t } e(q,u) = 0 \text{ trong } H^1(\Omega)' \text{ và } q_a \leq q. \tag{P}$$

Giá trị q_a là chặn dưới cho tham số q. Ràng buộc bất đẳng thức trong (P) có thể có hoặc không, trong nhiều bài toán thực hành nó là cần thiết và thường là $q \geq 0$. Cận trên cho q cũng có thể được thêm vào bài toán.

Định lí 3.2. *Nếu:*

$$\alpha_2(q_a) = \min\left\{\frac{c}{2}, q_a - \frac{\|\beta\|^2_{\mathbb{R}^d}}{2c}\right\} + \min\left\{0, \sigma C_\Gamma^2\right\} > 0,$$

thì (P) có nghiệm địa phương $x^* = (q^*, u^*)$.

Chứng minh. Ta kiểm tra tập các điểm chấp nhận được:

$$\mathcal{F}(\mathbf{P}) = \left\{(q,u) : e(q,u) = 0 \text{ và } q_a \leq q\right\},$$

là khác rỗng. Giả sử các điều kiện từ mệnh đề (2.3) đúng với mọi $q \in Q_{ad} = \{q \in \mathbb{R} : q \geq q_a\}$. Khi đó chọn $q = q_a$ và từ mệnh đề (2.3) tồn tại duy nhất nghiệm yếu $u = u(q)$, thỏa mãn $e(q,u) = 0$.

Từ đó tồn tại dãy $\{q^n, u^n\}_{n\in\mathbb{N}}$ trong $\mathcal{F}(\mathbf{P})$ và:

$$0 \leq \inf_{(q,u)\in\mathcal{F}(\mathbf{P})} J(q,u) = \lim_{n\to\infty} J(q^n, u^n) < \infty. \tag{3.4}$$

Ta chứng minh dãy này bị chặn. Giả sử $\lim\limits_{n\to\infty} q^n = \infty$. Khi đó J là không bị chặn theo q và $\lim\limits_{n\to\infty} J(q^n, u^n) = \infty$ do $\kappa > 0$, điều này mâu thuẫn với (3.4). Do đó tồn tại hằng số C_q không phụ thuộc vào n sao cho $|q^n| \leq C_q$ với mọi $n \in \mathbb{N}$. Áp dụng định lí Bolzano-Weierstrass tồn tại một dãy con $\{q^{n_k}\}_{k\in\mathbb{N}}$ với $q^{n_k} \to q^*$ khi $k \to \infty$ với $q^* \in \mathbb{R}$. Vì Q_{ad} là đóng, nên $q^* \geq q_a$.

Tiếp theo giả sử $\lim_{n\to\infty} \|u^n\|_{H^1(\Omega)} = \infty$. Do $(q^n, u^n) \in \mathcal{F}(\mathbf{P})$ với mọi $n \in \mathbb{N}$, điều kiện đẳng thức $e(q^n, u^n) = 0$ đúng, hay:

$$-c\Delta u^n + \beta \cdot \nabla u^n + q^n u^n = f \qquad \text{trong } \Omega, \tag{3.5}$$

$$c\frac{\partial u^n}{\partial n} + \sigma u^n = g \qquad \text{trên } \Gamma = \partial\Omega. \tag{3.6}$$

Nhân 2 vế 2 phương trình trên với u^n và lấy tích phân trên Ω, và trên biên Γ tương ứng ta được:

$$\begin{aligned}&\int_\Omega c\left\|\nabla u^n\right\|_{\mathbb{R}^d}^2\,\mathrm{d}x+\int_\Omega \beta\cdot\nabla u^n u^n\,\mathrm{d}x+\int_\Omega q^n\left|u^n\right|^2\,\mathrm{d}x+\int_\Gamma \sigma\left|u^n\right|^2\,\mathrm{d}s\\&=\int_\Omega f u^n\,\mathrm{d}x+\int_\Gamma g u^n\,\mathrm{d}s.\end{aligned} \tag{3.7}$$

Nhắc lại dạng song tuyến tính $B(\cdot,\cdot;q):H^1(\Omega)\times H^1(\Omega)\to\mathbb{R}$ với $q\geq q_a$ được giới thiệu ở phần trước:

$$B(u,\phi;q)=c\int_\Omega \nabla u\cdot\nabla\phi\mathrm{d}x+\sigma\int_\Gamma u\phi\mathrm{d}s+q\int_\Omega u\phi\mathrm{d}x+\int_\Omega\beta\cdot\nabla u\phi\mathrm{d}x,$$

với $u,\phi\in H^1(\Omega), q\in\mathcal{I}$. Phương trình (3.7) có thể viết lại :

$$B\left(u^n,u^n;q^n\right)=\int_\Omega f u^n\,\mathrm{d}x+\int_\Gamma g u^n\,\mathrm{d}s.$$

Áp dụng (2.4) ta được:

$$\int_\Omega f u^n\,\mathrm{d}x+\int_\Gamma g u^n\,\mathrm{d}s=B\left(u^n,u^n;q^n\right)\geq\alpha_2\left(q^n\right)\left\|u^n\right\|_{H^1(\Omega)}^2,$$

với:

$$\alpha_2\left(q^n\right)=\min\left\{\frac{c}{2},q^n-\frac{\|\beta\|_{\mathbb{R}^d}^2}{2c}\right\}+\min\left\{0,\sigma C_\Gamma^2\right\}.$$

Áp dụng bất đẳng thức Young với $\epsilon=\frac{1}{\alpha_2(q^n)}$, và định lí vết với C_Γ là kí hiệu của hằng số vết, ta được:

$$\begin{aligned}\alpha_2\left(q^n\right)\left\|u^n\right\|_{H^1(\Omega)}^2\leq&\|f\|_{L^2(\Omega)}\left\|u^n\right\|_{L^2(\Omega)}+\|g\|_{L^2(\Gamma)}\left\|u^n\right\|_{L^2(\Gamma)}\\\leq&\frac{1}{\alpha_2\left(q^n\right)}\|f\|_{L^2(\Omega)}^2+\frac{\alpha_2\left(q^n\right)}{4}\left\|u^n\right\|_{L^2(\Omega)}^2\\&+C_\Gamma\|g\|_{L^2(\Gamma)}\left\|u^n\right\|_{H^1(\Omega)}\\\leq&\frac{1}{\alpha_2\left(q^n\right)}\|f\|_{L^2(\Omega)}^2+\frac{\alpha_2\left(q^n\right)}{4}\left\|u^n\right\|_{H^1(\Omega)}^2+\frac{C_\Gamma^2}{\alpha_2\left(q^n\right)}\|g\|_{L^2(\Gamma)}^2\\&+\frac{\alpha_2\left(q^n\right)}{4}\left\|u^n\right\|_{H^1(\Omega)}^2.\end{aligned}$$

Do đó ta được:

$$\frac{\alpha_2(q^n)}{2}\|u^n\|^2_{H^1(\Omega)} \le \frac{1}{\alpha_2(q^n)}\|f\|^2_{L^2(\Omega)} + \frac{C_\Gamma^2}{\alpha_2(q^n)}\|g\|^2_{L^2(\Gamma)},$$

bởi vậy:

$$\begin{aligned}\|u^n\|^2_{H^1(\Omega)} &\le \frac{2}{\alpha_2(q^n)}\left(\frac{1}{\alpha_2(q^n)}\|f\|^2_{L^2(\Omega)} + \frac{C_\Gamma^2}{\alpha_2(q^n)}\|g\|^2_{L^2(\Gamma)}\right)\\ &= \frac{2}{\alpha_2(q^n)^2}\left(\|f\|^2_{L^2(\Omega)} + C_\Gamma^2\|g\|^2_{L^2(\Gamma)}\right) \le C,\end{aligned}$$

với $C = \frac{2}{\alpha_2(q_a)^2}\left(\|f\|^2_{L^2(\Omega)} + C_\Gamma^2\|g\|^2_{L^2(\Gamma)}\right) > 0$, $\alpha_2(q^n) > 0$ (vì $q^n \ge q_a$ với mọi $n \in \mathbb{N}$, nên ta có $\alpha_2(q^n) \ge \alpha_2(q_a) > 0$ với mọi $n \in \mathbb{N}$). Khi đó $\{u^n\}_{n\in\mathbb{N}}$ bị chặn đều trong không gian Hilbert $H^1(\Omega)$, và do đó nó có một dãy con hội tụ yếu về một phần tử $u^* \in H^1(\Omega)$ (kí hiệu $u^{n_k} \rightharpoonup u^*$), tức là tồn tại một dãy con $\{u^{n_k}\}_{k\in\mathbb{N}}$ với:

$$\lim_{k\to\infty}\langle u^{n_k} - u^*, \varphi\rangle_{H^1(\Omega)} = 0 \text{ với mọi } \varphi \in H^1(\Omega).$$

Đặc biệt:

$$\lim_{k\to\infty}\int_\Omega (u^{n_k} - u^*)\,\varphi \mathrm{d}x = 0 \text{ với mọi } \varphi \in L^2(\Omega), \tag{3.8}$$

và:

$$\lim_{k\to\infty}\int_\Omega \nabla(u^{n_k} - u^*)\cdot\nabla\varphi \mathrm{d}x = 0 \text{ với mọi } \varphi \in H^1(\Omega). \tag{3.9}$$

Phương trình (3.9) tương đương:

$$\int_\Omega \nabla(u^{n_k} - u^*)\cdot\psi \mathrm{d}x \to 0 \text{ với mọi } \psi \in L^2(\Omega)^d. \tag{3.10}$$

Toán tử vết $\tau_\Gamma : H^1(\Omega) \to L^2(\Gamma)$ là tuyến tính và bị chặn, do đó:

$$\begin{aligned}\|\tau_\Gamma u^{n_k}\|_{L^2(\Gamma)} &\le \sup_{\|\varphi\|_{H^1(\Omega)}=1}\|\tau_\Gamma\varphi\|_{L^2(\Gamma)}\|u^{n_k}\|_{H^1(\Omega)}\\ &\le \max_{\|\varphi\|_{H^1(\Omega)}=1} C_\Gamma\|\varphi\|_{H^1(\Omega)}\|u^{n_k}\|_{H^1(\Omega)} = C_\Gamma\|u^{n_k}\|_{H^1(\Omega)}.\end{aligned}$$

Vì u^{n_k} bị chặn trong $H^1(\Omega), \tau_\Gamma u^{n_k}$ bị chặn trong $L^2(\Gamma)$, ta được $\tau_\Gamma u^{n_k} \rightharpoonup \tau_\Gamma u^*$. Do đó theo tính chất của hội tụ yếu:

$$\lim_{k\to\infty} \int_\Gamma \left(u^{n_k} - u^*\right) \varphi \mathrm{d}x = 0 \text{ với mọi } \varphi \in L^2(\Gamma). \tag{3.11}$$

Do $(q^{n_k}, u^{n_k}) \in \mathcal{F}(\mathbf{P})$ với mọi $k \in \mathbb{N}$,

$$\int_\Omega c\nabla u^{n_k} \cdot \nabla\varphi \mathrm{d}x + \int_\Omega \beta \cdot \nabla u^{n_k} \varphi \mathrm{d}x + \int_\Omega q^{n_k} u^{n_k} \varphi \mathrm{d}x - \int_\Omega f\varphi \mathrm{d}x$$
$$+ \int_\Gamma \sigma u^{n_k} \varphi \mathrm{d}s - \int_\Gamma g\varphi \mathrm{d}s = 0,$$

đúng với mọi $k \in \mathbb{N}$ và $\varphi \in H^1(\Omega)$. Ta sẽ chứng minh từng phần trong tổng trên chứa u^{n_k} hoặc q^{n_k} hội tụ (yếu) đến phần tương ứng với q^* và u^*.

Ta có $\int_\Omega c\nabla u^{n_k} \cdot \nabla\varphi \mathrm{d}x$ hội tụ đến $\int_\Omega c\nabla u^* \cdot \nabla\varphi \mathrm{d}x$ vì:

$$\int_\Omega c\nabla u^{n_k} \cdot \nabla\varphi \mathrm{d}x - \int_\Omega c\nabla u^* \cdot \nabla\varphi \mathrm{d}x = \int_\Omega \nabla\left(u^{n_k} - u^*\right) \cdot \nabla(c\varphi) \mathrm{d}x,$$

$c\varphi \in H^1(\Omega)$, và (3.9). Do sự hội tụ yếu của $\{u^{n_k}\}_{k\in\mathbb{N}}$ khẳng định đúng.

$\int_\Omega \beta \cdot \nabla u^{n_k} \varphi \mathrm{d}x$ hội tụ tới $\int_\Omega \beta \cdot \nabla u^* \varphi \mathrm{d}x$ vì:

$$\int_\Omega \beta \cdot \nabla u^{n_k} \varphi \mathrm{d}x - \int_\Omega \beta \cdot \nabla u^* \varphi \mathrm{d}x = \int_\Omega \nabla\left(u^{n_k} - u^*\right) \cdot (\varphi\beta) \mathrm{d}x,$$

$\varphi\beta \in L^2(\Omega)^d$, và (3.10).

Với tích phân $\int_\Omega q^{n_k} u^{n_k} \varphi \mathrm{d}x$. Ta có:

$$\left| \int_\Omega q^{n_k} u^{n_k} \varphi \mathrm{d}x - \int_\Omega q^* u^* \varphi \mathrm{d}x \right| = \left| \int_\Omega \left(q^{n_k} u^{n_k} - q^* u^*\right) \varphi \mathrm{d}x \right|$$

$$
\begin{aligned}
&= \left| \int_\Omega \left(q^{n_k} - q^*\right) u^{n_k} \varphi \mathrm{d}x + \int_\Omega q^* \left(u^{n_k} - u^*\right) \varphi \mathrm{d}x \right| \\
&\le \left|q^{n_k} - q^*\right| \int_\Omega \left|u^{n_k} \varphi\right| \mathrm{d}x \\
&\quad + \left| \int_\Omega \left(u^{n_k} - u^*\right) \left(q^* \varphi\right) \mathrm{d}x \right| \\
&\le \left|q^{n_k} - q^*\right| \left\|u^{n_k}\right\|_{L^2(\Omega)} \|\varphi\|_{L^2(\Omega)} \\
&\quad + \left| \int_\Omega \left(u^{n_k} - u^*\right) \left(q^* \varphi\right) \mathrm{d}x \right|.
\end{aligned}
$$

Phần thứ hai của vế phải hội tụ tới 0 vì $q^*\varphi \in L^2(\Omega)$ và (3.8). Với phần đầu tiên ta có $\left\|u^{n_k}\right\|_{L^2(\Omega)} \|\varphi\|_{L^2(\Omega)} < \infty$ với mọi $k \in \mathbb{N}$ vì $\left\|u^{n_k}\right\|_{L^2(\Omega)}$ bị chặn không phụ thuộc vào n_k và φ thuộc $L^2(\Omega)$, q^{n_k} hội tụ tới q^*, nên phần đầu này hội tụ tới 0.

Cuối cùng ta xem xét thành phần $\int_\Gamma \sigma u^{n_k} \varphi \mathrm{d}s$. Ta có:

$$
\int_\Gamma \sigma u^{n_k} \varphi \mathrm{d}s - \int_\Gamma \sigma u^* \varphi \mathrm{d}s = \int_\Gamma \left(u^{n_k} - u^*\right) (\sigma\varphi) \mathrm{d}s,
$$

$\sigma\varphi \in L^2(\Omega)$, từ (3.11) ta được $e\left(q^{n_k}, u^{n_k}\right) \to e\left(q^*, u^*\right)$, và do đó $e\left(q^*, u^*\right) = 0$.

Do chuẩn $L^2(\Gamma)$ trong (3.22), là nửa liên tục dưới yếu. Nghĩa là, nếu $u^n \rightharpoonup u^*$, ta sẽ được $\left(u^n - u_\Gamma\right) \rightharpoonup \left(u^* - u_\Gamma\right)$, do đó theo định nghĩa của nửa liên tục dưới yếu ta được:

$$
\left\|u^* - u_\Gamma\right\|_{L^2(\Gamma)} \le \lim_{k\to\infty} \left\|u^{n_k} - u_\Gamma\right\|_{L^2(\Gamma)}.
$$

Do đó, ta được:

$$
\inf_{(q,u)\in\mathcal{F}(\mathbf{P})} J(q,u) = \lim_{k\to\infty} J\left(q^{n_k}, u^{n_k}\right) \ge J\left(q^*, u^*\right),
$$

vì vậy $\left(q^*, u^*\right)$ là nghiệm của (P). $\square$

3.2 Điều kiện cần tối ưu bậc nhất

Hàm Lagrange cho bài toán (P) là:

$$\mathcal{L}(q,u,p,\lambda) = J(q,u) + \langle e(q,u),p\rangle_{H^1(\Omega)',H^1(\Omega)} + \lambda\left(q_a - q\right), \qquad (3.12)$$

với các nhân tử Lagrange $p \in H^1(\Omega)$ và $\lambda \in \mathbb{R}$.

Để xây dựng điều kiện tối ưu bậc nhất cho (P) với các nhân tử Lagrange ta cần chứng minh J và e có đạo hàm Fréchet và $x^* = (q^*,u^*)$ là điểm chính quy.

Định nghĩa 3.3. Cho B_1 và B_2 là các không gian Banach và $f : B_1 \to B_2$. Nếu tồn tại toán tử $\mathcal{A} \in L\left(B_1,B_2\right)$ sao cho tại $x \in B_1$

$$\lim_{\|y\|_{B_1}\searrow 0} \frac{\|f(x+y)-f(x)-\mathcal{A}y\|_{B_2}}{\|y\|_{B_1}} = 0,$$

khi đó $\mathcal{A}y$ được gọi là đạo hàm Fréchet của $f(x)$ tại x và kí hiệu là $\delta f(x;y)$. Toán tử $\mathcal{A}$ được gọi là đạo hàm Fréchet của $f(x)$ tại x, và kí hiệu là $\mathcal{A} = f'(x)$ và $\delta f(x;y) = f'(x)y$.

Nhận xét 3.4. Trên không gian Hilbert $\mathbb{R}\times H^1(\Omega)$ ta định nghĩa một tích vô hướng:

$$\langle (q,u),(\tilde{q},\tilde{u})\rangle_{\mathbb{R}\times H^1(\Omega)} = \langle q,\tilde{q}\rangle_{\mathbb{R}} + \langle u,\tilde{u}\rangle_{H^1(\Omega)} = q\tilde{q} + \langle u,\tilde{u}\rangle_{H^1(\Omega)},$$

với $(q,u),(\tilde{q},\tilde{u}) \in \mathbb{R}\times H^1(\Omega)$ và chuẩn tương ứng:

$$\|(q,u)\|^2_{\mathbb{R}\times H^1(\Omega)} = |q|^2 + \|u\|^2_{H^1(\Omega)}.$$

Bổ đề 3.5. *Toán tử J có đạo hàm Fréchet.*

Chứng minh. Đầu tiên ta tính đạo hàm của J theo hướng δu. Ta có:

$$\begin{aligned}
\nabla_u J(q,u)\delta u &= \frac{d}{dt}J(q,u+t\delta u)\Big|_{t=0} = \lim_{t\searrow 0}\frac{J(q,u+t\delta u)-J(q,u)}{t}\\
&= \lim_{t\searrow 0}\Bigg(\frac{\frac{\alpha}{2}\int_\Gamma |u+t\delta u-u_\Gamma|^2\ \mathrm{d}s+\frac{\kappa}{2}|q-q_d|^2}{t}\\
&\quad -\frac{\frac{\alpha}{2}\int_\Gamma |u-u_\Gamma|^2\ \mathrm{d}s+\frac{\kappa}{2}|q-q_d|^2}{t}\Bigg)\\
&= \lim_{t\searrow 0}\frac{\frac{\alpha}{2}\int_\Gamma\left(t^2\delta u^2+2t\delta u\,(u-u_\Gamma)\right)\mathrm{d}s}{t}\\
&= \lim_{t\searrow 0}\frac{\alpha}{2}\int_\Gamma\Big(t\delta u^2+2\delta u\,(u-u_\Gamma)\Big)\,\mathrm{d}s = \alpha\int_\Gamma (u-u_\Gamma)\,\delta u\ \mathrm{d}s.
\end{aligned}$$

Theo định nghĩa (3.3), J có đạo hàm Fréchet nếu:

$$\lim_{\|\delta u\|_{H^1(\Omega)}\searrow 0}\frac{\big|J(q,u+\delta u)-J(q,u)-\nabla_u J(q,u)\delta u\big|}{\|\delta u\|_{H^1(\Omega)}} = 0.$$

Ta chứng minh đạo hàm theo hướng cũng là đạo hàm Fréchet. Ta có:

$$\begin{aligned}
&\big|J(q,u+\delta u)-J(q,u)-\nabla_u J(q,u)\delta u\big|\\
&= |\frac{\alpha}{2}\int_\Gamma |u+\delta u-u_\Gamma|^2\,\mathrm{d}s+\frac{\kappa}{2}|q-q_d|^2-\frac{\alpha}{2}\int_\Gamma |u-u_\Gamma|^2\ \mathrm{d}s-\frac{\kappa}{2}|q-q_d|^2\\
&-\alpha\int_\Gamma (u-u_\Gamma)\,\delta u\ \mathrm{d}s|\\
&= |\frac{\alpha}{2}\int_\Gamma\Big(|u-u_\Gamma|^2+|\delta u|^2+2\,(u-u_\Gamma)\,\delta u\Big)\,\mathrm{d}s-\frac{\alpha}{2}\int_\Gamma |u-u_\Gamma|^2\ \mathrm{d}s\\
&-\alpha\int_\Gamma (u-u_\Gamma)\,\delta u\ \mathrm{d}s\ |\\
&= \frac{\alpha}{2}\int_\Gamma |\delta u|^2\,\mathrm{d}s = \frac{\alpha}{2}\|\delta u\|^2_{L^2(\Gamma)} \le \frac{\alpha C_\Gamma^2}{2}\|\delta u\|^2_{H^1(\Omega)}\left(= O\left(\|\delta u\|^2_{H^1(\Omega)}\right)\right),
\end{aligned}$$

bởi vậy:

$$\begin{aligned}
0 \le &\lim_{\|\delta u\|_{H^1(\Omega)}\searrow 0}\frac{\big|J(q,u+\delta u)-J(q,u)-\nabla_u J(q,u)\delta u\big|}{\|\delta u\|_{H^1(\Omega)}}\\
\le &\lim_{\|\delta u\|_{H^1(\Omega)}\searrow 0}\frac{\alpha C_\Gamma^2}{2}\|\delta u\|^2_{H^1(\Omega)} = \lim_{\|\delta u\|_{H^1(\Omega)}\searrow 0}\frac{\alpha C_\Gamma^2}{2}\|\delta u\|_{H^1(\Omega)} = 0.
\end{aligned}$$

Từ đó ta có:

$$\lim_{\|\delta u\|_{H^1(\Omega)} \searrow 0} \frac{\left|J(q, u+\delta u) - J(q, u) - \nabla_u J(q, u)\delta u\right|}{\|\delta u\|_{H^1(\Omega)}} = 0.$$

Do đó J có đạo hàm Fréchet theo u.

Vì q là vô hướng, đặt $\nabla_q J(q, u)\delta q = \kappa\,(q - q_d)\,\delta q$ ta được:

$$\begin{aligned}
&\left|J(q+\delta q, u) - J(q, u) - \nabla_q J(q, u)\delta q\right| = |\frac{\alpha}{2}\int_\Gamma |u - u_\Gamma|^2 \,\mathrm{d}s \\
&+ \frac{\kappa}{2}\,|q + \delta q - q_d|^2 - \frac{\alpha}{2}\int_\Gamma |u - u_\Gamma|^2 \,\mathrm{d}s - \frac{\kappa}{2}\,|q - q_d|^2 - \kappa\,(q - q_d)\,\delta q\,| \\
=&|\frac{\kappa}{2}|q - q_d|^2 + \frac{\kappa}{2}|\delta q|^2 + \kappa|q - q_d||\delta q| - \frac{\kappa}{2}|q - q_d|^2 - \kappa\,(q - q_d)\,\delta q\right| \\
&= \frac{\kappa}{2}|\delta q|^2,
\end{aligned}$$

do đó:

$$\begin{aligned}
&\lim_{|\delta q| \searrow 0} \frac{\left|J(q+\delta q, u) - J(q, u) - \nabla_q J(q, u)\delta q\right|}{|\delta q|} \\
&= \lim_{|\delta q| \searrow 0} \frac{\frac{\kappa}{2}|\delta q|^2}{|\delta q|} = \lim_{|\delta q| \searrow 0} \frac{\kappa}{2}|\delta q| = 0.
\end{aligned}$$

Do đó J có đạo hàm Fréchet theo q. □

Bổ đề 3.6. *Toán tử song tuyến tính e có đạo hàm Fréchet với mọi $(q, u) \in \mathbb{R} \times H^1(\Omega)$.*

Chứng minh. Đạo hàm theo hướng $\nabla e(q, u) : \mathbb{R} \times H^1(\Omega) \to H^1(\Omega)'$ định nghĩa bởi:

$$\nabla e(q, u)(\delta q, \delta u) = \frac{d}{dt} e(q + t\delta q, u + t\delta u)\bigg|_{t=0},$$

có dạng:

$$\begin{aligned}
\langle \nabla e(q, u)(\delta q, \delta u), \varphi\rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)} &= \int_\Omega c\nabla\delta u \cdot \nabla\varphi \mathrm{d}x + \int_\Omega \beta \cdot \nabla\delta u\varphi \mathrm{d}x \\
&+ \int_\Omega \delta q u\varphi \mathrm{d}x + \int_\Omega q\delta u\varphi \mathrm{d}x + \int_\Gamma \sigma\delta u\varphi \mathrm{d}s,
\end{aligned}$$

với $(q,u) \in \mathbb{R} \times H^1(\Omega), \varphi \in H^1(\Omega)$ và hướng $(\delta q, \delta u) \in \mathbb{R} \times H^1(\Omega)$.

Ta có:

$$\begin{aligned}
&\|e(q+\delta q, u+\delta u) - e(q,u) - \nabla e(q,u)(\delta q, \delta u)\|_{H^1(\Omega)'} \\
&= \sup_{\|\varphi\|_{H^1(\Omega)}=1} \langle e(q+\delta q, u+\delta u) - e(q,u) - \nabla e(q,u)(\delta q,\delta u), \varphi\rangle_{H^1(\Omega)',H^1(\Omega)} \\
&= \sup_{\|\varphi\|_{H^1(\Omega)}=1} \big(\langle e(q+\delta q, u+\delta u), \varphi\rangle_{H^1(\Omega)',H^1(\Omega)} - \langle e(q,u), \varphi\rangle_{H^1(\Omega)',H^1(\Omega)} \\
&\quad -\langle \nabla e(q,u)(\delta q,\delta u), \varphi\rangle_{H^1(\Omega)',H^1(\Omega)}\big) \\
&= \sup_{\|\varphi\|_{H^1(\Omega)}=1} \int_\Omega \delta q \delta u \varphi \mathrm{d}x \le \sup_{\|\varphi\|_{H^1(\Omega)}=1} |\delta q| \|\delta u\|_{L^2(\Omega)} \|\varphi\|_{L^2(\Omega)} \\
&\le \sup_{\|\varphi\|_{H^1(\Omega)}=1} \big|\delta q \|\delta u\|_{H^1(\Omega)} \|\varphi\|_{H^1(\Omega)} = \big| \delta q \mid \|\delta u\|_{H^1(\Omega)} \\
&\le \frac{1}{2}\left(|\delta q|^2 + \|\delta u\|^2_{H^1(\Omega)}\right) \le \frac{1}{2}\|(\delta q, \delta u)\|^2_{\mathbb{R}\times H^1(\Omega)},
\end{aligned}$$

do đó:

$$\begin{aligned}
&\lim_{\|(\delta q,\delta u)\|_{\mathbb{R}\times H^1(\Omega)} \searrow 0} \frac{\|e(q+\delta q, u+\delta u) - e(q,u) - \nabla e(q,u)(\delta q,\delta u)\|_{H^1(\Omega)'}}{\|(\delta q,\delta u)\|_{\mathbb{R}\times H^1(\Omega)}} \\
&\le \lim_{\|(\delta q,\delta u)\|_{\mathbb{R}\times H^1(\Omega)} \searrow 0} \frac{1}{2}\|(\delta q,\delta u)\|_{\mathbb{R}\times H^1(\Omega)} = 0.
\end{aligned}$$

Do đó, $\nabla e(q,u)(\delta q, \delta u)$ là đạo hàm Fréchet của $e(q,u)$. □

Mệnh đề 3.7. *Với các điều kiện của mệnh đề (2.3). Khi đó toán tử* $\nabla e(q,u)$ *là toàn ánh với mọi* $(q,u) \in Q_{ad} \times H^1(\Omega)$.

Chứng minh. Với mọi $F \in H^1(\Omega)'$ ta cần tìm $(\delta q, \delta u) \in \mathbb{R} \times H^1(\Omega)$ sao cho:

$$\langle \nabla e(q,u)(\delta q,\delta u), \varphi\rangle_{H^1(\Omega)',H^1(\Omega)} = \langle F, \varphi\rangle_{H^1(\Omega)',H^1(\Omega)} \text{ với mọi } \varphi \in H^1(\Omega). \tag{3.13}$$

Ta chọn $\delta q = 0$. Khi đó ta có :

$$\langle \nabla e(q,u)(0,\delta u), \varphi\rangle_{H^1(\Omega)',H^1(\Omega)} = \int_\Omega c\nabla\delta u \cdot \nabla\varphi \mathrm{d}x + \int_\Omega \beta \cdot \nabla \delta u \varphi \mathrm{d}x$$

$$+\int_{\Omega} q\delta u\varphi + \int_{\Gamma} \sigma u\varphi \mathrm{d}s.$$

Sử dụng lí luận trong chứng minh mệnh đề (2.3) ta được - với điều kiện $\alpha_2(q_a) > 0$, tồn tại duy nhất phần tử δu sao cho (3.13) đúng với mọi $(q, u) \in Q_{ad} \times H^1(\Omega)$. □

Nhận xét 3.8. Từ chứng minh của mệnh đề (3.7) ta có $\nabla_u e(q, u) : H^1(\Omega) \to H^1(\Omega)'$ là song ánh.

Bây giờ ta xác định đạo hàm Fréchet của hàm Lagrange theo q, u, và p và do đó ta có điều kiện tối ưu bậc nhất cho bài toán tối ưu (P):

Định lí 3.9. ***(Điều kiện cần tối ưu bậc nhất)*** *Với $x^* = (q^*, u^*)$ là nghiệm địa phương của (P). Với các giả thiết của mệnh đề (2.3) được thỏa mãn. Khi đó tồn tại các nhân tử Lagrange $p^* \in H^1(\Omega)$ và $\lambda^* \geq 0$ thỏa mãn điều kiện tối ưu:*

$$\kappa(q^* - q_d)\delta q + \int_{\Omega} u^* p^* \delta q \,\mathrm{d}x - \lambda^* \delta q = 0, \tag{3.14}$$

với mọi $\delta q \in \mathbb{R}$, phương trình liên hợp:

$$\begin{aligned} &\alpha \int_{\Gamma} (u^* - u_\Gamma)\delta u \,\mathrm{d}s + \int_{\Omega} c\nabla p^* \cdot \nabla \delta u \,\mathrm{d}x \\ &+ \int_{\Omega} p^* \beta \cdot \nabla \delta u \,\mathrm{d}x + \int_{\Omega} q^* p^* \delta u \,\mathrm{d}x + \int_{\Gamma} \sigma p^* \delta u \,\mathrm{d}s = 0, \end{aligned} \tag{3.15}$$

với mọi $\delta u \in H^1(\Omega)$, và phương trình trạng thái:

$$\begin{aligned} &\int_{\Omega} c\nabla u^* \cdot \nabla \delta p \,\mathrm{d}x + \int_{\Omega} \beta \cdot \nabla u^* \delta p \,\mathrm{d}x + \int_{\Omega} q^* u^* \delta p \,\mathrm{d}x \\ &- \int_{\Omega} f\delta p \,\mathrm{d}x + \int_{\Gamma} \sigma u^* \delta p \,\mathrm{d}s - \int_{\Gamma} g\delta p \,\mathrm{d}s = 0, \end{aligned} \tag{3.16}$$

với mọi $\delta p \in H^1(\Omega)$. Các phương trình (3.14), (3.15), (3.16) được gọi là hệ Karush-KuhnTucker (KKT) của (P).

Chứng minh. Từ bổ đề (3.5) và (3.6) ta được $\mathcal{L}$ có đạo hàm Fréchet. Từ mệnh đề (3.7) tồn tại duy nhất nhân tử Lagrange $p^* \in H^1(\Omega)$ và $\lambda^* \geq 0$ sao cho:

$$\nabla_q \mathcal{L}\left(q^*, u^*, p^*, \lambda^*\right) \delta q = 0 \text{ với mọi } \delta q \in \mathbb{R}, \tag{3.17}$$

$$\nabla_u \mathcal{L}\left(q^*, u^*, p^*, \lambda^*\right) \delta u = 0 \text{ với mọi } \delta u \in H^1(\Omega), \tag{3.18}$$

và:

$$\nabla_p \mathcal{L}\left(q^*, u^*, p^*, \lambda^*\right) \delta p = 0 \text{ với mọi } \delta p \in H^1(\Omega). \tag{3.19}$$

Ta tính đạo hàm của $\mathcal{L}$ theo q :

$$\nabla_q \mathcal{L}\left(q^*, u^*, p^*, \lambda^*\right) \delta q = \kappa\left(q^* - q_d\right) \delta q + \int_\Omega u^* p^* \delta q \,\mathrm{d}x - \lambda^* \delta q,$$

với mọi $\delta q \in \mathbb{R}$. Do đó (3.17) suy ra (3.14).

Tương tự ta đạo hàm $\mathcal{L}$ theo u:

$$\begin{aligned}\nabla_u \mathcal{L}\left(q^*, u^*, p^*, \lambda^*\right) \delta u = {} & \alpha \int_\Gamma \left(u^* - u_\Gamma\right) \delta u \,\mathrm{d}s + \int_\Omega c \nabla p^* \cdot \nabla \delta u \,\mathrm{d}x \\ & + \int_\Omega p^* \beta \cdot \nabla \delta u \,\mathrm{d}x + \int_\Omega q^* p^* \delta u \,\mathrm{d}x + \int_\Gamma \sigma p^* \delta u \,\mathrm{d}s.\end{aligned}$$

Do (3.18), với điểm tối ưu x^* và nhân tử Lagrange tối ưu p^*, λ^*, số hạng này bằng 0 với mọi hướng $\delta u \in H^1(\Omega)$, nghĩa là ở dạng mạnh ta thu được bài toán giá trị biên elliptic:

$$\begin{aligned} & -c\Delta p^* - \beta \cdot \nabla p^* + q^* p^* = 0 \quad \text{trong } \Omega, \\ & c\frac{\partial p^*}{\partial n} + (\sigma + \beta \cdot n) p^* = \alpha\left(u_\Gamma - u^*\right) \quad \text{trên } \Gamma. \end{aligned}$$

Đạo hàm $\mathcal{L}$ theo p, ta được:

$$\begin{aligned}\nabla_p \mathcal{L}\left(q^*, u^*, p^*, \lambda^*\right) \delta p = {} & \int_\Omega c \nabla u^* \cdot \nabla \delta p \,\mathrm{d}x + \int_\Omega \beta \cdot \nabla u^* \delta p \,\mathrm{d}x \\ & + \int_\Omega q^* u^* \delta p \,\mathrm{d}x - \int_\Omega f \delta p \,\mathrm{d}x + \int_\Gamma \sigma u^* \delta p \,\mathrm{d}s - \int_\Gamma g \delta p \,\mathrm{d}s,\end{aligned}$$

với mọi $\delta p \in H^1(\Omega)$. Từ (3.19), ta nhận được (3.16). $\square$

Nhận xét 3.10. Từ

$$\nabla_u \mathcal{L}(q^*, u^*, p^*, \lambda^*) = \nabla_u J(q^*, u^*) + \nabla_u e(q^*, u^*)^* p^* = 0.$$

Ta được

$$\nabla_u e(q^*, u^*)^* p^* = -\nabla_u J(q^*, u^*),$$

với $\nabla_u e(q^*, u^*)^* : H^1(\Omega) \to H^1(\Omega)'$ là toán tử liên hợp của $\nabla_u e(q^*, u^*)$ thỏa mãn:

$$\left\langle \nabla_u e(q^*, u^*)^* p, \delta u \right\rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)} = \left\langle \nabla_u e(q^*, u^*) \delta u, p \right\rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)},$$

với mọi $p, \delta u \in H^1(\Omega)$.

Từ nhận xét (3.8) ta biết $\nabla_u e(q^*, u^*)$ là song ánh, nên nó cũng đơn ánh, do đó p^* là tồn tại duy nhất.

3.3 Thay thế ràng buộc bất đẳng thức

Hàm chi phí có thể xét ở dạng sau:

$$J^{\varrho}_{\hat{\lambda}}(q, u) = J(q, u) + \frac{1}{2\varrho} \max\left\{0, \hat{\lambda} + \varrho(q_a - q)\right\}^2, \tag{3.20}$$

với $\varrho > 0$ và $\hat{\lambda} > 0$.

Bổ đề 3.11. *Điều kiện bất đẳng thức:*

$$q_a - q^* \leq 0, \tag{3.21}$$

cùng với điều kiện không âm:

$$\lambda^* \geq 0, \tag{3.22}$$

và điều kiện bổ sung:

$$\lambda^* (q_a - q^*) = 0, \tag{3.23}$$

với nghiệm tối ưu λ^* và q^* tương đương với điều kiện đẳng thức:

$$\lambda^* = \max\left\{0, \lambda^* + \varrho\left(q_a - q^*\right)\right\}. \tag{3.24}$$

Chứng minh. Từ (3.23), ít nhất một trong hai điều kiện (3.21) và (3.22) phải đạt được dấu bằng. Để chứng minh (3.21), (3.22), và (3.23) suy ra (3.24), ta xét ba trường hợp:

Với $\lambda^* = 0$ và $q_a - q^* = 0$. Khi đó (3.24) đúng.

Với $\lambda^* > 0$ và $q_a - q^* = 0$.

Ta có $\max\left\{0, \lambda^* + \varrho\left(q_a - q^*\right)\right\} = \max\left\{0, \lambda^* + 0\right\} = \lambda^*$, do đó (3.24) đúng.

Với $\lambda^* = 0$ và $q_a - q^* < 0$. Ta có $\max\left\{0, \lambda^* + \varrho\left(q_a - q^*\right)\right\} = 0$, do đó (3.24) đúng.

Giả sử (3.24) đúng. Hiển nhiên (3.22) đúng. Giả sử $q_a - q^* > 0$ đúng. Khi đó với mọi $\varrho > 0$ ta có:

$$\lambda^* = \max\left\{0, \lambda^* + \varrho\left(q_a - q^*\right)\right\} = \lambda^* + \varrho\left(q_a - q^*\right) > \lambda^*,$$

vô lí , do đó (3.21) đúng.

Nếu $\lambda^* > 0$. Giả sử $q_a - q^* < 0$ đúng, ta lấy $\varrho = \frac{-\lambda^*}{q_a - q^*} > 0$ khi đó:

$$\lambda^* = \max\left\{0, \lambda^* + \varrho\left(q_a - q^*\right)\right\} = \max\left\{0, \lambda^* - \frac{\lambda^*}{q_a - q^*}\left(q_a - q^*\right)\right\} = 0,$$

mâu thuẫn với $\lambda^* > 0$. Do đó, $q_a - q^* = 0$ và (3.23) đúng.

Tiếp theo ta xét trường hợp $q_a - q^* < 0$ đúng. Giả sử $\lambda^* > 0$ ta lấy $\varrho = \frac{-\lambda^*}{q_a - q^*} > 0$ khi đó:

$$\lambda^* = \max\left\{0, \lambda^* + \varrho\left(q_a - q^*\right)\right\} = \max\left\{0, \lambda^* - \frac{\lambda^*}{q_a - q^*}\left(q_a - q^*\right)\right\} = 0.$$

Mâu thuẫn do đó (3.23) đúng. $\square$

Với hàm chi phí mới $J_{\hat{\lambda}}^{\varrho}$ ta đã thay thế ràng buộc bất đẳng thức bằng hàm phạt $\frac{1}{2\varrho}\max\left\{0, \hat{\lambda} + \varrho\left(q_a - q\right)\right\}^2$. Do đó, ta được bài toán điều khiển tối ưu sau:

$$\min J_{\hat{\lambda}}^{\varrho}(q, u) \text{ s.t } (q, u) \in \mathbb{R} \times H^1(\Omega) \text{ thỏa mãn (2.1).} \qquad (\mathbf{P}_{\hat{\lambda}}^{\varrho})$$

Theo chứng minh của định lí (3.2) ta có ($\mathbf{P}_{\hat{\lambda}}^{\varrho}$) có nghiệm địa phương. Hiển nhiên, bài toán mới thay đổi hệ KKT của ta nếu: $\hat{\lambda} + \varrho\left(q_a - q\right) > 0$.

Bài toán tối ưu ($\mathbf{P}_{\hat{\lambda}}^{\varrho}$) có thể được giải bằng phương pháp SQP toàn cục. Một nghiệm cho ($\mathbf{P}_{\hat{\lambda}}^{\varrho}$) cũng là một nghiệm cho bài toán (P) với giá trị đủ lớn của ϱ, nghĩa là tồn tại $\underline{\varrho} > 0$ sao cho nghiệm của ($\mathbf{P}_{\hat{\lambda}}^{\varrho}$) là một nghiệm của (P) với $\varrho \geq \underline{\varrho}$ được chứng minh cụ thể trong [13].

Tóm tắt ý tưởng ta có thuật toán sau:

Thuật toán 3.1 (Phương pháp Lagrange tăng cường)

(1) *Chọn* $\lambda^0 \geq 0, \varrho_0 > 0$*, và* $\beta^{\varrho} > 1$*. Đặt* $k = 0$*. Chọn điều kiện dừng phù hợp.*

(2) *Xác định nghiệm* $x^{k+1} = \left(q^{k+1}, u^{k+1}\right)$ *của* ($\mathbf{P}_{\hat{\lambda}}^{\varrho}$) *với* $\varrho = \varrho_k$ *và* $\hat{\lambda} = \lambda^k$ *và nhân tử Lagrange* p^{k+1} *bằng cách áp dụng thuật toán 3.2 (Phương pháp SQP toàn cục).*

(3) *Cập nhật nhân tử Lagrange* $\lambda^{k+1} = \max\left\{0, \lambda^k + \varrho_k\left(q_a - q^k\right)\right\}$.

(4) *Cho đến khi điều kiện dừng được thỏa mãn, đặt* $\varrho_{k+1} = \beta^{\varrho}\varrho_k, k = k + 1$*, và tiếp tục bước (2).*

Hàm Lagrange tăng cường có dạng:

$$\begin{aligned}\mathcal{L}^{\varrho}_{\hat{\lambda}}(q,u,p) =& J^{\varrho}_{\hat{\lambda}}(q,u) + \langle e(q,u), p\rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)} \\ =& \frac{\alpha}{2}\int_{\Gamma} |u-u_\Gamma|^2 \, \mathrm{d}s + \frac{\kappa}{2}|q-q_d|^2 \\ &+ \frac{1}{2\varrho}\max\left\{0, \hat{\lambda} + \varrho\,(q_a - q)\right\}^2 + \int_\Omega c\nabla u\cdot\nabla p \, \mathrm{d}x \\ &+ \int_\Omega \beta\cdot\nabla u p \, \mathrm{d}x + \int_\Omega qup \, \mathrm{d}x - \int_\Omega fp \, \mathrm{d}x \\ &+ \int_\Gamma \sigma up \, \mathrm{d}s - \int_\Gamma gp \, \mathrm{d}s.\end{aligned}$$

Ta thấy $\nabla_q\mathcal{L}^{\varrho}_{\hat{\lambda}}(q,u,p)\delta q$ là đạo hàm riêng duy nhất khác với đạo hàm riêng của $\mathcal{L}(q,u,p,\lambda)$. Ta được:

$$\nabla_q\mathcal{L}^{\varrho}_{\hat{\lambda}}(q,u,p)\delta q = \kappa\,(q-q_d)\,\delta q + \int_\Omega up\delta q \, \mathrm{d}x - \max\left\{0, \hat{\lambda} + \varrho\,(q_a-q)\right\}\delta q.$$

Trong Hessian của $\mathcal{L}^{\varrho}_{\hat{\lambda}}(q,u,p)$ phần duy nhất có thể thay đổi so với phần tương ứng trong $\nabla^2\mathcal{L}(q,u,p,\lambda)$ là khi ta tính $\nabla^2_{(q,q)}\mathcal{L}^{\varrho}_{\hat{\lambda}}(q,u,p)$. Rõ ràng phần này sẽ không đổi nếu $\lambda + \varrho\,(q_a-q) \leq 0$. Nếu $\lambda + \varrho\,(q_a-q) > 0$, ta được $\nabla^2_{(q,q)}\mathcal{L}^{\varrho}_{\hat{\lambda}}(q,u,p) = \kappa + \varrho$.

3.3.1. Phương pháp SQP cho ($\mathbf{P}^{\varrho}_{\hat{\lambda}}$)

Ta giải bài toán tối ưu ($\mathbf{P}^{\varrho}_{\hat{\lambda}}$) trong mỗi lần lặp bằng phương pháp sequential quadratic programming (SQP) được trình bày cụ thể trong [14]. Ta có thuật toán:

Thuật toán 3.2 (Phương pháp SQP toàn cục)

(1) *Đặt* $q^0 = q^k, u^0 = u^k$ *và* $p^0 = p^k$. *Đặt* $i = 0$. *Chọn điều kiện dừng phù hợp. Đặt* $\varrho = \varrho_k$ *và* $\hat{\lambda} = \lambda^k$.

(2) *Với* q^i, u^i, p^i *tính Hessian* $\nabla^2\mathcal{L}^{\varrho}_{\hat{\lambda}}\left(q^i, u^i, p^i\right)$ *và đạo hàm Fréchet*

$\nabla\mathcal{L}^{\varrho}_{\hat{\lambda}}\left(q^i, u^i, p^i\right)$ *với* $\hat{\lambda} = \lambda^k + \varrho\left(q_a - q^i\right)$ *với mỗi bước lặp SQP* $x^i = \left(q^i, u^i\right)$.

(3) *Tìm nghiệm của hệ tuyến tính* $\nabla^2\mathcal{L}^{\varrho}_{\hat{\lambda}}\left(q^i, u^i, p^i\right)\Delta\hat{x} = -\nabla\mathcal{L}^{\varrho}_{\hat{\lambda}}\left(q^i, u^i, p^i\right)$ *với* $\Delta\hat{x} = (\Delta q, \Delta u, \Delta p)^T$.

(4) *Nếu* $\nabla^2_{xx}\mathcal{L}^{\varrho}_{\hat{\lambda}}\left(q^i, u^i, p^i\right)$ *không thỏa mãn điều kiện bức, biến đổi ma trận Hessian (sẽ trình bày ở phần sau) và quay lại bước (3).*

(5) *Thực hiện tìm kiếm L1-line search theo hướng* $\Delta\hat{x}$ *(sẽ trình bày ở phần sau) để nhận được bước nhảy s.*

(6) *Cho đến khi điều kiện dừng được thỏa mãn, đặt* $q^{i+1} = q^i + s\Delta q, u^{i+1} = u^i + s\Delta u, p^{i+1} = p^i + s\Delta p$, *đặt* $i = i + 1$, *và tiếp tục bước (2). Nếu điều kiện dừng thỏa mãn, đặt* $q^{k+1} = q^i, u^{k+1} = u^i$, *và* $p^{k+1} = p^i$ *và tiếp tục bước (3) trong thuật toán 3.1.*

Vì trong phương pháp SQP ta bắt buộc phải tính Hessian của hàm Lagrange. Do đó ta có các điều kiện tối ưu bậc hai. Để xây dựng các điều kiện tối ưu bậc hai, tất nhiên ta cần hàm chi phí J và toán tử song tuyến tính e có đạo hàm Fréchet cấp hai. Chứng minh điều này tương tự định lí (3.5) và (3.6). Mặt khác, ta đã chỉ ra trong mệnh đề (3.7) toán tử $\nabla e(q, u)$ là toàn ánh.

Ta sẽ đưa ra các điều kiện tối ưu bậc hai cho hàm Lagrange cho bởi:

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}^{\varrho,\gamma}_{\hat{\lambda}}(q, u, p) =& J^{\varrho}_{\hat{\lambda}}(q, u) + \left\langle e^{\gamma}(q, u), p\right\rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)} \\
=& \frac{\alpha}{2}\int_\Gamma |u - u_\Gamma|^2\, ds + \frac{\kappa}{2}|q - q_d|^2 \\
&+ \frac{1}{2\varrho}\max\left\{0, \hat{\lambda} + \varrho\left(q_a - q\right)\right\}^2 + \int_\Omega c\nabla u\cdot\nabla p\,\mathrm{d}x \\
&+ \int_\Omega \beta\cdot\nabla u p\,\mathrm{d}x + \int_\Omega \gamma q u p\,\mathrm{d}x - \int_\Omega f p\,\mathrm{d}x \\
&+ \int_\Gamma \sigma u p\,\mathrm{d}s - \int_\Gamma g p\,\mathrm{d}s.
\end{aligned}$$

Với $\gamma = 1$ ta có $\mathcal{L}^{\varrho,\gamma}_{\hat{\lambda}} \equiv \mathcal{L}^{\varrho}_{\hat{\lambda}}$.

Để đảm bảo điều kiện tối ưu bậc hai phù hợp nhất, ta sử dụng hai bổ đề sau:

Bổ đề 3.12. *Với* $x^* = (q^*, u^*)$ *là nghiệm tối ưu của (P) và đặt* $(\delta q, \delta u) \in \operatorname{Ker}\big(\nabla e\,(q^*, u^*)\big)$. *Khi đó:*

$$\|\delta u\|_{H^1(\Omega)} \leq C_u |\delta q|,$$

đúng với $C_u := \frac{\|u^*\|_{L^2(\Omega)}}{\alpha_2(q_a)}$.

Chứng minh. Từ định nghĩa của $\operatorname{Ker}\big(\nabla e\,(q^*, u^*)\big)$ ta có

$$\nabla e\,(q^*, u^*)\,(\delta q, \delta u) = 0.$$

Do đó:

$$\begin{gathered}\big\langle \nabla e\,(q^*, u^*)\,(\delta q, \delta u), \varphi \big\rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)} = \int_\Omega c \nabla \delta u \cdot \nabla \varphi \mathrm{d}x \\ + \int_\Omega \beta \cdot \nabla \delta u \varphi \mathrm{d}x + \int_\Omega \delta q u^* \varphi \mathrm{d}x + \int_\Omega q^* \delta u \varphi \mathrm{d}x + \int_\Gamma \sigma \delta u \varphi \mathrm{d}s = 0\end{gathered}, \quad (3.25)$$

đúng với mọi $\varphi \in H^1(\Omega)$. Ta có phương trình (3.25) là phương trình biến phân của phương trình elliptic:

$$-c\Delta \delta u + \beta \cdot \nabla \delta u + q^* \delta u = -\delta q u^* \qquad \text{trong } \Omega, \quad (3.26)$$

$$c\frac{\partial \delta u}{\partial n} + \sigma \delta u = 0 \qquad \text{trên } \Gamma. \quad (3.27)$$

Phương trình này tương ứng với phương trình trạng thái của ràng buộc đẳng thức $e\,(q^*, \delta u) = 0$, với $f = -\delta q u^*$ và $g = 0$. Do đó, hàm $F \in H^1(\Omega)'$ đưa ra trong (2.3) cho bởi:

$$\langle F, \varphi \rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)} = \int_\Omega (-\delta q u^*)\, \varphi \mathrm{d}x.$$

Từ nhận xét (2.4) với mọi $q \geq q_a$ ta có :

$$\alpha_2(q) \geq \alpha_2\left(q_a\right) = \min\left\{\frac{c}{2}, q_a - \frac{\|\beta\|^2_{\mathbb{R}^d}}{2c}\right\} + \min\left\{0, \sigma C_\Gamma^2\right\} > 0.$$

Khi đó, bất đẳng thức:

$$B(\delta u, \delta u; q) \geq \alpha_2\left(q_a\right) \|\delta u\|^2_{H^1(\Omega)},$$

đúng với mọi $q \geq q_a$. Từ mệnh đề (2.3) tồn tại duy nhất nghiệm $\delta u \in H^1(\Omega)$ của (3.26) thỏa mãn:

$$B(\delta u, \phi; q) = \langle F, \phi\rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)} \text{ với mọi } \phi \in H^1(\Omega),$$

bởi vậy:

$$\langle F, \delta u\rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)} = B(\delta u, \delta u; q) \geq \alpha_2\left(q_a\right) \|\delta u\|^2_{H^1(\Omega)}.$$

Từ định nghĩa chuẩn của hàm $F \in H^1(\Omega)'$

$$\|F\|_{H^1(\Omega)'} := \sup_{\|\varphi\|_{H^1(\Omega)}=1} \langle F, \varphi\rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)}.$$

Ta có:

$$\|\delta u\|^2_{H^1(\Omega)} \leq \frac{1}{\alpha_2\left(q_a\right)} \langle F, \delta u\rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)} \leq \frac{1}{\alpha_2\left(q_a\right)} \|F\|_{H^1(\Omega)'} \|\delta u\|_{H^1(\Omega)},$$

bởi vậy:

$$
\begin{aligned}
\|\delta u\|_{H^1(\Omega)} &\leq \frac{1}{\alpha_2\left(q_a\right)} \sup_{\|\varphi\|_{H^1(\Omega)}=1} \langle F, \varphi\rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)} \\
&= \frac{1}{\alpha_2\left(q_a\right)} \sup_{\|\varphi\|_{H^1(\Omega)}=1} \left(-\int_\Omega \delta q u^* \varphi \mathrm{d}x\right) \\
&\leq \frac{1}{\alpha_2\left(q_a\right)} \sup_{\|\varphi\|_{H^1(\Omega)}=1} \left(|\delta q| \left\langle |u^*|, |\varphi| \right\rangle_{L^2(\Omega)}\right) \\
&\leq \frac{1}{\alpha_2\left(q_a\right)} \sup_{\|\varphi\|_{H^1(\Omega)}=1} \left(|\delta q| \left\|u^*\right\|_{L^2(\Omega)} \|\varphi\|_{L^2(\Omega)}\right) \\
&\leq \frac{1}{\alpha_2\left(q_a\right)} \sup_{\|\varphi\|_{H^1(\Omega)}=1} \left(|\delta q| \left\|u^*\right\|_{L^2(\Omega)} \|\varphi\|_{H^1(\Omega)}\right) \\
&= \frac{1}{\alpha_2\left(q_a\right)} |\delta q| \left\|u^*\right\|_{L^2(\Omega)} = C_u |\delta q|.
\end{aligned}
$$

Ta được điều cần chứng minh. □

Nhận xét 3.13. Đối với bài toán tối ưu ($\mathbf{P}_{\hat{\lambda}}^{\varrho}$) điều kiện tối ưu (3.14) được thay thế bằng:

$$
\kappa\left(q^*-q_d\right) \delta q+\int_\Omega u p \delta q \,\mathrm{d}x-\max \left\{0, \hat{\lambda}+\varrho\left(q_a-q^*\right)\right\} \delta q=0. \quad (3.28)
$$

Hai điều kiện tối ưu còn lại (3.15) và (3.16) không thay đổi.

Bổ đề 3.14. *Với (q^*, u^*, p^*) là nghiệm của điều kiện tối ưu bậc nhất (3.28), (3.15), và (3.16). Khi đó:*

$$
\left\|p^*\right\|_{H^1(\Omega)} \leq \frac{C_\Gamma}{\hat{\alpha}_2\left(q_a\right)}\left\|\alpha\left(u_\Gamma-u^*\right)\right\|_{L^2(\Gamma)},
$$

với $\hat{\alpha}_2\left(q_a\right)=\min \left\{\frac{c}{2}, q-\frac{\|\beta\|_{\mathrm{R}^d}^2}{2c}\right\}+\min \left\{0,(\sigma+\beta \cdot n) C_\Gamma^2\right\}>0.$

Chứng minh. Dạng mạnh của phương trình liên hợp (3.15) được cho bởi:

$$
-c \Delta p^*-\beta \cdot \nabla p^*+q^* p^*=0 \qquad \text{trong } \Omega,
$$

$$c\frac{\partial p^*}{\partial n} + (\sigma + \beta \cdot n)p^* = \alpha(u_\Gamma - u^*) \qquad \text{trên } \Gamma.$$

Ta định nghĩa toán tử song tuyến tính $\hat{B}(\cdot, \cdot; q)$ với $q \geq q_a$ cố định bởi:

$$\begin{aligned}\hat{B}\left(p^*, \phi; q\right) = &\int_\Omega c\nabla p^* \cdot \nabla \phi \mathrm{d}x + \int_\Omega p^* \beta \cdot \nabla \phi \mathrm{d}x \\ &+ \int_\Omega q^* p^* \phi \mathrm{d}x + \int_\Gamma \sigma p^* \phi \mathrm{d}s.\end{aligned}$$

Tương tự chứng minh của mệnh đề (2.3) ta có với:

$$\hat{\alpha}_2\left(q_a\right) = \min\left\{\frac{c}{2}, q_a - \frac{\|\beta\|^2_{R^d}}{2c}\right\} + \min\left\{0, (\sigma + \beta \cdot n)C^2_\Gamma\right\} > 0,$$

và $\hat{F} \in H^1(\Omega)'$ cho bởi:

$$\langle \hat{F}, \varphi \rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)} = \int_\Gamma \alpha\left(u_\Gamma - u^*\right) \varphi \mathrm{d}s, \text{ với } \varphi \in H^1(\Omega),$$

ta có:

$$\hat{B}\left(p^*, p^*; q\right) \geq \hat{\alpha}_2\left(q_a\right) \|p^*\|^2_{H^1(\Omega)},$$

và

$$\hat{B}\left(p^*, \phi; q\right) = \langle \hat{F}, \phi \rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)} \text{ với mọi } \phi \in H^1(\Omega).$$

Ta được:

$$\begin{aligned}\hat{\alpha}_2\left(q_a\right) \|p^*\|^2_{H^1(\Omega)} &\leq \hat{B}\left(p^*, p^*; q\right) = \left\langle \hat{F}, p^* \right\rangle_{H^1(\Omega)', H^1(\Omega)} \\ &\leq \|\hat{F}\|_{H^1(\Omega)'} \|p^*\|_{H^1(\Omega)},\end{aligned}$$

do đó:

$$\begin{aligned}
\|p^*\|_{H^1(\Omega)} &\leq \frac{1}{\hat{\alpha}_2\left(q_a\right)}\|\hat{F}\|_{H^1(\Omega)'} = \frac{1}{\hat{\alpha}_2\left(q_a\right)} \sup_{\|\varphi\|_{H^1(\Omega)}=1} \langle \hat{F}, \varphi\rangle_{H^1(\Omega)',H^1(\Omega)} \\
&= \frac{1}{\hat{\alpha}_2\left(q_a\right)} \sup_{\|\varphi\|_{H^1(\Omega)}=1} \int_\Gamma \alpha\left(u_\Gamma - u^*\right)\varphi \mathrm{d}s \\
&\leq \frac{1}{\hat{\alpha}_2\left(q_a\right)} \sup_{\|\varphi\|_{H^1(\Omega)}=1} \Big(\big\|\alpha\left(u_\Gamma - u^*\right)\big\|_{L^2(\Gamma)} \|\varphi\|_{L^2(\Gamma)}\Big) \\
&\leq \frac{1}{\hat{\alpha}_2\left(q_a\right)} \sup_{\|\varphi\|_{H^1(\Omega)}=1} \Big(\big\|\alpha\left(u_\Gamma - u^*\right)\big\|_{L^2(\Gamma)} C_\Gamma \|\varphi\|_{H^1(\Omega)}\Big) \\
&= \frac{C_\Gamma}{\hat{\alpha}_2\left(q_a\right)} \big\|\alpha\left(u_\Gamma - u^*\right)\big\|_{L^2(\Gamma)},
\end{aligned}$$

ta được điều cần chứng minh. □

Định lí tiếp theo là điều kiện đủ tối ưu bậc hai cho bài toán tối ưu vô hạn chiều (được trình bày trong [15].

Định lí 3.15. *Cho* $\left(q^*, u^*, p^*\right)$ *là nghiệm của điều kiện tối ưu bậc nhất (3.28), (3.15), và (3.16). Nếu* $\nabla^2_{xx}\mathcal{L}^{\varrho,\gamma}_{\hat{\lambda}}\left(q^*, u^*, p^*\right)$ *thỏa mãn điều kiện bức trên* $\operatorname{Ker}\big(\nabla e\left(q^*, u^*\right)\big)$*, khi đó* $\left(q^*, u^*, p^*\right)$ *là nghiệm của (*$\mathbf{P}^{\varrho}_{\hat{\lambda}}$*).*

Định lí tiếp theo đưa ra điều kiện đủ để thỏa mãn định lí (3.15) với bài toán ($\mathbf{P}^{\varrho}_{\hat{\lambda}}$).

Định lí 3.16. *Cho* $\left(q^*, u^*, p^*\right)$ *là nghiệm của điều kiện tối ưu bậc nhất (3.28), (3.15), và (3.16). Nếu:*

$$\gamma < \frac{\hat{\alpha}_2\left(q_a\right)\min\left\{\frac{\kappa}{2}, \frac{\kappa}{2C_u^2}\right\}}{C_\Gamma \big\|\alpha\left(u_\Gamma - u^*\right)\big\|_{L^2(\Gamma)}}, \tag{3.29}$$

khi đó $\nabla^2_{xx}\mathcal{L}^{\varrho,\gamma}_{\hat{\lambda}}\left(q^*, u^*, p^*\right)$ *thỏa mãn điều kiện bức trên* $\operatorname{Ker}\big(\nabla e\left(q^*, u^*\right)\big)$*, do đó* $\left(q^*, u^*, p^*\right)$ *là nghiệm tối ưu của (*$\mathbf{P}^{\varrho}_{\hat{\lambda}}$*).*

Chứng minh. Ta có:

$$\nabla^2_{xx}\mathcal{L}^{\varrho,\gamma}_{\hat{\lambda}}(q^*,u^*,p^*)\left((\delta q,\delta u),(\delta q,\delta u)\right) = \kappa|\delta q|^2 + 2\gamma\delta q\int_\Gamma p\delta u\,\mathrm{d}s + \alpha\|\delta u\|^2_{L^2(\Gamma)},$$

với $(\delta q,\delta u)\in\mathbb{R}\times H^1(\Omega)$ và ta cần chứng minh với điều kiện (3.29) điều kiện bức của $\nabla^2_{xx}\mathcal{L}^{\varrho,\gamma}_{\hat{\lambda}}(q^*,u^*,p^*)$ trên $\operatorname{Ker}\big(\nabla e(q^*,u^*)\big)$ được đảm bảo nghĩa là:

$$\nabla^2_{xx}\mathcal{L}^{\varrho,\gamma}_{\hat{\lambda}}(q^*,u^*,p^*)\left((\delta q,\delta u),(\delta q,\delta u)\right) \geq \eta\|(\delta q,\delta u)\|^2_{\mathbb{R}\times H^1(\Omega)}, \tag{3.30}$$

với $(\delta q,\delta u)\in\operatorname{Ker}\big(\nabla e(q^*,u^*)\big)$ và hằng số $\eta>0$.

Đầu tiên ta xét trường hợp $\gamma=0$. Theo bổ đề (3.12) ta được:

$$\begin{aligned}\nabla^2_{xx}\mathcal{L}^{\varrho,0}_{\hat{\lambda}}(q^*,u^*,p^*)\left((\delta q,\delta u),(\delta q,\delta u)\right) &= \kappa|\delta q|^2 + \alpha\|\delta u\|^2_{L^2(\Gamma)}\\ &= \frac{\kappa}{2}|\delta q|^2 + \frac{\kappa}{2}|\delta q|^2 + \alpha\|\delta u\|^2_{L^2(\Gamma)}\\ &\geq \frac{\kappa}{2}|\delta q|^2 + \frac{\kappa}{2C_u^2}\|\delta u\|^2_{H^1(\Omega)}\\ &\geq \min\left\{\frac{\kappa}{2},\frac{\kappa}{2C_u^2}\right\}\|(\delta q,\delta u)\|^2_{\mathbb{R}\times H^1(\Omega)}.\end{aligned}$$

Do đó, (3.30) thỏa mãn với $\eta:=\min\left\{\frac{\kappa}{2},\frac{\kappa}{2C_u^2}\right\}>0$. Với $\gamma>0$, áp dụng bổ đề (3.14) ta có:

$$\begin{aligned}&\nabla^2_{xx}\mathcal{L}^{\varrho,\gamma}_{\hat{\lambda}}(q^*,u^*,p^*)\left((\delta q,\delta u),(\delta q,\delta u)\right)\\ \geq&\frac{\kappa}{2}|\delta q|^2 + \frac{\kappa}{2C_u^2}\|\delta u\|^2_{H^1(\Omega)} - 2\gamma\int_\Omega\big|\delta q\|p^*\big|\,|\delta u|\mathrm{d}x\\ \geq&\frac{\kappa}{2}|\delta q|^2 + \frac{\kappa}{2C_u^2}\|\delta u\|^2_{H^1(\Omega)} - 2\gamma|\delta q|\,\|p^*\|_{L^2(\Omega)}\,\|\delta u\|_{L^2(\Omega)}\\ \geq&\frac{\kappa}{2}|\delta q|^2 + \frac{\kappa}{2C_u^2}\|\delta u\|^2_{H^1(\Omega)} - 2\gamma|\delta q|\,\|p^*\|_{H^1(\Omega)}\,\|\delta u\|_{H^1(\Omega)}\\ \geq&\frac{\kappa}{2}|\delta q|^2 + \frac{\kappa}{2C_u^2}\|\delta u\|^2_{H^1(\Omega)} - 2\gamma\frac{C_\Gamma}{\hat{\alpha}_2(q_a)}\big\|\alpha(u_\Gamma-u^*)\big\|_{L^2(\Gamma)}|\delta q|\|\delta u\|_{H^1(\Omega)}\end{aligned}$$

$$\geq \frac{\kappa}{2}|\delta q|^2 + \frac{\kappa}{2C_u^2}\|\delta u\|^2_{H^1(\Omega)}$$
$$-2\gamma \frac{C_\Gamma}{\hat{\alpha}_2(q_a)} \left\|\alpha\left(u_\Gamma - u^*\right)\right\|_{L^2(\Gamma)} \frac{1}{2}\left(|\delta q|^2 + \|\delta u\|^2_{H^1(\Omega)}\right)$$
$$\geq \left(\min\left\{\frac{\kappa}{2}, \frac{\kappa}{2C_u^2}\right\} - \gamma \frac{C_\Gamma}{\hat{\alpha}_2(q_a)} \left\|\alpha\left(u_\Gamma - u^*\right)\right\|_{L^2(\Gamma)}\right) \|(\delta q, \delta u)\|^2_{\mathbb{R}\times H^1(\Omega)}.$$

Do đó nếu (3.29) đúng, hằng số:

$$\hat{\eta} := \min\left\{\frac{\kappa}{2}, \frac{\kappa}{2C_u^2}\right\} - \gamma \frac{C_\Gamma}{\hat{\alpha}_2(q_a)} \left\|\alpha\left(u_\Gamma - u^*\right)\right\|_{L^2(\Gamma)} > 0,$$

và (3.30) đúng với $\eta = \hat{\eta}$. □

Nhận xét 3.17. Từ định lí (3.16), $\nabla^2_{xx}\mathcal{L}^{\varrho,\gamma}_{\hat{\lambda}}(q^*, u^*, p^*)$ thỏa mãn điều kiện bức nếu:

$$\gamma \left\|\alpha\left(u_\Gamma - u^*\right)\right\|_{L^2(\Gamma)} < \frac{\hat{\alpha}_2(q_a)}{C_\Gamma} \min\left\{\frac{\kappa}{2}, \frac{\kappa}{2C_u^2}\right\},$$

nghĩa là $\gamma \left\|\alpha\left(u_\Gamma - u^*\right)\right\|_{L^2(\Gamma)}$ đủ nhỏ. Do đó nếu u^* gần với u_Γ trên biên Γ theo chuẩn L^2, tham số damping γ có thể lấy bằng 1.

Định lí tiếp theo khẳng định tính hội tụ địa phương của phương pháp SQP với tỉ lệ hội tụ bậc 2 .

Định lí 3.18. *Cho (q^*, u^*) là nghiệm của ($\mathbf{P}^{\varrho}_{\hat{\lambda}}$). Với $\nabla e(q^*, u^*)$ là toàn ánh, và $\nabla^2_{xx}\mathcal{L}^{\varrho}_{\hat{\lambda}}(q^*, u^*, p^*)$ thỏa mãn điều kiện bức trên $\operatorname{Ker}\left(\nabla e(q^*, u^*)\right)$. Khi đó, vì phương pháp SQP tương đương cục bộ với phương pháp Newton áp dụng cho điều kiện tối ưu bậc nhất, sự hội tụ của phương pháp SQP mà ta áp dụng trong bài toán là địa phương bậc hai, nghĩa là tồn tại $\rho > 0$ và $C > 0$ thỏa mãn:*

$$\left\|\left(q^{i+1}, u^{i+1}, p^{i+1}\right) - (q^*, u^*, p^*)\right\|_{\mathbb{R}\times H^1(\Omega)\times H^1(\Omega)}$$
$$\leq C \left\|\left(q^i, u^i, p^i\right) - (q^*, u^*, p^*)\right\|^2_{\mathbb{R}\times H^1(\Omega)\times H^1(\Omega)}, \text{ với mọi } i \in \mathbb{N},$$

nếu cho giá trị khởi tạo $\left\|\left(q^0,u^0,p^0\right)-(q^*,u^*,p^*)\right\|_{\mathbb{R}\times H^1(\Omega)\times H^1(\Omega)}<\rho\,.$

Nhận xét 3.19. Hệ phương trình tuyến tính, đối xứng ở bước (3) của Thuật toán 3.2 có thể được giải, ví dụ, bằng phương pháp phân tích LU.

3.3.2. Damping Hessian

Với $\nabla^2_{xx}\mathcal{L}^{\varrho}_{\hat{\lambda}}(q,u,p)$ ta biểu thị Hessian gồm đạo hàm riêng cấp 2 theo biến $x=(q,u)$. Nghĩa là $\nabla^2_{xx}\mathcal{L}^{\varrho}_{\hat{\lambda}}(q,u,p)$ có dạng :

$$\nabla^2_{xx}\mathcal{L}^{\varrho}_{\hat{\lambda}}(q,u,p)=\begin{pmatrix}\kappa+\varrho & p\\ p & \alpha\end{pmatrix},$$

nếu $\lambda+\varrho\,(q_a-q)>0$, và có dạng:

$$\nabla^2_{xx}\mathcal{L}^{\varrho}_{\hat{\lambda}}(q,u,p)=\begin{pmatrix}\kappa & p\\ p & \alpha\end{pmatrix},$$

nếu $\lambda+\varrho\,(q_a-q)\le 0$. Toán tử $\nabla^2_{xx}\mathcal{L}^{\varrho}_{\hat{\lambda}}(q,u,p)$ cần thỏa mãn điều kiện bức trên $\operatorname{Ker}\nabla e(q,u)$ để có được một hướng giảm. Điều kiện này có thể không thỏa mãn tại mọi bước lặp $\hat{x}=(q,u,p)$. Để tránh vấn đề này, ta làm giảm một số phần tử của $\nabla^2_{xx}\mathcal{L}^{\varrho}_{\hat{\lambda}}(q,u,p)$ có thể ảnh hưởng đến việc không thỏa mãn điều kiện bức của Hessian . Những phần tử này là $\nabla^2_{(q,u)}\mathcal{L}^{\varrho}_{\hat{\lambda}}(q,u,p)$ và $\nabla^2_{(u,q)}\mathcal{L}^{\varrho}_{\hat{\lambda}}(q,u,p)$. Ta thay đổi toán tử $\nabla^2_{xx}\mathcal{L}^{\varrho}_{\hat{\lambda}}(q,u,p)$ một chút để nhận được damped Hessian $\nabla^2_{xx}\mathcal{L}^{\varrho,\gamma}_{\hat{\lambda}}(q,u,p)$:

$$\nabla^2_{xx}\mathcal{L}^{\varrho,\gamma}_{\hat{\lambda}}(q,u,p)=\begin{pmatrix}\kappa(+\varrho) & \gamma p\\ \gamma p & \alpha\end{pmatrix},$$

như trong [16]. Ta cần:

$$\nabla^2_{xx}\mathcal{L}^{\varrho,\gamma}_{\hat{\lambda}}\left(q^*,u^*,p^*\right)\left((\Delta q,\Delta u),(\Delta q,\Delta u)\right) \geq \eta\left(|\Delta q|^2+\|\Delta u\|^2_{H^1(\Omega)}\right), \tag{3.31}$$

với hướng $(\Delta q, \Delta u)$ được tính trong bước (3) của thuật toán 3.1, với η là một giá trị lớn hơn 0. Tại mỗi bước lặp i ta có:

$$\begin{aligned}&\nabla^2_{xx}\mathcal{L}^{\varrho,\gamma}_{\hat{\lambda}}\left(q^i,u^i,p^i\right)\left(\left(\Delta q^i,\Delta u^i\right),\left(\Delta q^i,\Delta u^i\right)\right)\\ &=\kappa\left|\Delta q^i\right|^2+2\gamma\Delta q^i\int_\Gamma p^i\Delta u^i\,\mathrm{d}s+\alpha\left\|\Delta u^i\right\|^2_{L^2(\Gamma)},\end{aligned}$$

Với $\gamma=0$, ta được $\nabla^2_{xx}\mathcal{L}^{\varrho,0}_{\hat{\lambda}}\left(q^i,u^i,p^i\right)$ xác định dương vì cách xác định α và κ. Mục đích của ta là ước tính $\nabla^2_{xx}\mathcal{L}^{\varrho}_{\hat{\lambda}}\left(q^i,u^i,p^i\right)$ đủ tốt. Do đó, ta cố gắng tìm giá trị γ nằm giữa 0 và 1 thỏa mãn (3.31). Chú ý với:

$$\gamma \leq C_\gamma := \frac{\eta\left(\left|\Delta q^i\right|^2+\left\|\Delta u^i\right\|^2_{H^1(\Omega)}\right)-\kappa\left|\Delta q^i\right|^2-\alpha\left\|\Delta u^i\right\|^2_{H^1(\Omega)}}{2\Delta q^i\int_\Gamma p^i\Delta u^i\,\mathrm{d}s},$$

ta được (3.31). Do đó, ta có thể chọn:

$$\gamma^i := \max\left\{0,\min\left\{\xi C_\gamma,1\right\}\right\},$$

tại mỗi bước lặp thứ i của SQP với $\xi=0.9$ chẳng hạn.

3.3.3. Line search

Phương pháp Lagrange tăng cường SQP vẫn có thể không hội tụ dù mỗi bước lặp đảm bảo tính xác định dương của ma trận Hessian. Do đó, ta cố gắng khắc phục việc này bằng cách chọn line search phù hợp.

Một kĩ thuật có thể sử dụng là Armijo-rule như trong [16] yêu cầu với bước nhảy s bất đẳng thức sau đúng:

$$\varphi^i(s)-\varphi^i(0)\leq\varepsilon s\left(\bar{\varphi}^i(1)-\bar{\varphi}^i(0)\right), \tag{3.32}$$

với hằng số cố định $\varepsilon \in \left[10^{-4}, 10^{-3}\right]$, tại mỗi bước lặp i hàm φ^i được định nghĩa cho $x^i = \left(q^i, u^i\right)$ bởi :

$$\varphi^i(s) = J\left(x^i + s\Delta x^i\right) + \mu \left\| e\left(x^i + s\Delta x^i\right)\right\|_{H^1(\Omega)}, \text{ với } s \in [0,1],$$

và tuyến tính hóa của nó $\bar{\varphi}^i$ định nghĩa bởi:

$$\bar{\varphi}^i(s) = J\left(x^i\right) + s\nabla J\left(x^i\right)\Delta x^i + \mu \left\| e\left(x^i\right) + s\nabla e\left(x^i\right)\Delta x^i\right\|_{H^1(\Omega)},$$

với $s \in [0,1]$ và tham số phạt $\mu \geq 0$.

Chú ý $\nabla e\left(x^i\right)\Delta x^i = -e\left(x^i\right)$ đúng (do phương trình thứ ba của bước thứ 3 trong thuật toán SQP), và do đó ta có:

$$\bar{\varphi}^i(s) = J\left(x^i\right) + s\nabla J\left(x^i\right)\Delta x^i + \mu \left\| e\left(x^i\right)\right\|_{H^1(\Omega)}(1-s), \text{ với } s \in [0,1].$$

Phần phạt $\mu \left\| e\left(x^i\right)\right\|_{H^1(\Omega)}$ có thể hiểu là ta muốn đánh đổi tính giảm của hàm chi phí J với việc đo sự vi phạm ràng buộc $e\left(x^i\right) = 0$. Với giá trị lớn của μ tính giảm của hàm φ^i được đảm bảo.

Về mặt tính toán, ta cần tăng tham số μ cho đến khi điều kiện

$$\bar{\varphi}^i(1) - \bar{\varphi}^i(0) < 0,$$

được thỏa mãn. Giá trị này cho μ được chèn vào giữa hai hàm φ^i và $\bar{\varphi}^i$. Bây giờ ta có thể bắt đầu Armijo-type line search. Ta giảm bước nhảy s - ví dụ giảm 1 nửa - cho đến khi (3.32) thỏa mãn.

3.4 Xấp xỉ Galerkin của thuật toán SQP

Trong các thử nghiệm số ta xấp xỉ u bởi các tổ hợp tuyến tính của phần tử hữu hạn hoặc cơ sở POD.

Ta kí hiệu nghiệm bởi phương pháp phần tử hữu hạn là u^h và bởi POD là u^ℓ. Các hệ số của hàm cơ sở tương ứng (cơ sở của phần tử hữu hạn là φ_i với $i = 1, \dots, n_{FE}$ và cơ sở POD là ψ_i với $i = 1, \dots, \ell$) được kí hiệu bởi u_i^h và u_i^ℓ, nghĩa là:

$$u^h(x) = \sum_{i=1}^{n_{FE}} \mathrm{u}_i^h \varphi_i(x),$$

và:

$$u^\ell(x) = \sum_{i=1}^{\ell} u_i^\ell \psi_i(x).$$

Ta làm tương tự với nhân tử Lagrange $p \in H^1(\Omega)$, ta định nghĩa xấp xỉ theo phần tử hữu hạn của p bởi:

$$p^h(x) = \sum_{i=1}^{n_{FE}} \mathrm{p}_i^h \varphi_i(x),$$

và bởi POD bởi:

$$p^\ell(x) = \sum_{i=1}^{\ell} \mathrm{p}_i^\ell \psi_i(x),$$

với p_i^h và p_i^ℓ là các hệ số tương ứng. Ta muốn rời rạc các điều kiện tối ưu liên tục (3.14) -(3.16) cho bài toán (P) bởi hệ hữu hạn chiều không tuyến tính.

Ta xem xét tích vô hướng trong L^2 của hàm u^h và p^h:

$$\begin{aligned}\int_\Omega u^h(x)p^h(x)\mathrm{d}x &= \int_\Omega \sum_{i=1}^{n_{FE}} \mathrm{u}_i^h \varphi_i(x) \sum_{j=1}^{n_{FE}} \mathrm{p}_j^h \varphi_j(x)\mathrm{d}x \\ &= \sum_{i=1}^{n_{FE}} \sum_{j=1}^{n_{FE}} \mathrm{u}_i^h \int_\Omega \varphi_i(x)\varphi_j(x)\mathrm{d}x \mathrm{p}_j^h = \sum_{i=1}^{n_{FE}} \sum_{j=1}^{n_{FE}} \mathrm{u}_i^h \mathrm{M}_{ij}^h \mathrm{p}_j^h.\end{aligned}$$

Với M^h ta định nghĩa là ma trận đối xứng xác định dương với mỗi phần tử M_{ij}^h là tích vô hướng trong L^2 của hàm cơ sở phần tử hữu hạn φ_i và φ_j với $1 \le i, j \le n_{FE}$. Do đó, rời rạc theo phần tử hữu hạn của điều kiện tối ưu bậc nhất (3.14) là:

$$\kappa\left(q-q_d\right)+\left(\mathrm{u}^h\right)^T\mathrm{M}^h\mathrm{p}^h-\lambda=0, \tag{3.33}$$

với u^h và p^h là các vectơ chứa hệ số $\left\{\mathrm{u}_i^h\right\}_{i=1}^{n_{FE}}$ và $\left\{\mathrm{p}_i^h\right\}_{i=1}^{n_{FE}}$ trong xấp xỉ phần tử hữu hạn. Ta định nghĩa ma trận đối xứng, nửa xác định dương $\mathrm{BD}^h \in \mathbb{R}^{n_{FE}\times n_{FE}}$ bởi:

$$\mathrm{BD}_{ij}^h=\int_\Gamma \varphi_i(x)\varphi_j(x)\mathrm{d}s \text{ với } 1\le i,j\le n_{FE}.$$

Chú ý $\mathrm{BD}_{ij}^h=\left\langle\varphi_i(x),\varphi_j(x)\right\rangle_{L^2(\Gamma)}$ với $1\le i,j\le n_{FE}$. Do đó ta có thể viết $\alpha\int_\Gamma\left(u^h-u_\Gamma^h\right)\delta u^h\,\mathrm{d}s$ như sau:

$$\begin{aligned}
\alpha\int_\Gamma\left(u^h-u_\Gamma^h\right)\delta u^h\,\mathrm{d}s&=\alpha\int_\Gamma\sum_{i=1}^{n_{FE}}\left(\mathrm{u}_i^h-\left(\mathrm{u}_\Gamma^h\right)_i\right)\varphi_i(x)\sum_{j=1}^{n_{FE}}\delta\mathrm{u}_j^h\varphi_j(x)\mathrm{d}s\\
&=\alpha\sum_{i=1}^{n_{FE}}\sum_{j=1}^{n_{FE}}\left(\mathrm{u}_i^h-\left(\mathrm{u}_\Gamma^h\right)_i\right)\int_\Gamma\varphi_i(x)\varphi_j(x)\mathrm{d}s\delta\mathrm{u}_j^h\\
&=\alpha\left(\mathrm{u}^h-\mathrm{u}_\Gamma^h\right)^T\mathrm{BD}^h\delta\mathrm{u}^h,
\end{aligned}$$

với $\delta\mathrm{u}^h$ là vectơ chứa các hệ số $\left\{\delta\mathrm{u}_i^h\right\}_{i=1}^{n_{FE}}$ của cơ sở phần tử hữu hạn.

Ta định nghĩa ma trận đối xứng, nửa xác định dương $\hat{\mathrm{S}}^h\in\mathbb{R}^{n_{FE}\times n_{FE}}$ bởi:

$$\hat{\mathrm{S}}_{ij}^h=\int_\Omega\int_\Omega\nabla\varphi_i(x)\cdot\nabla\varphi_j(x)\mathrm{d}x \text{ với } 1\le i,j\le n_{FE}.$$

Chú ý $\hat{\mathrm{S}}^h=\mathrm{S}^h-\mathrm{M}^h$, với S^h là ma trận độ cứng ta đã giới thiệu trong (2.17). Khi đó ta được:

$$\begin{aligned}
\int_\Omega c\nabla p^h\cdot\nabla\delta u^h\,\mathrm{d}x&=c\int_\Omega\nabla\left(\sum_{i=1}^{n_{FE}}\mathrm{p}_i^h\varphi_i(x)\right)\cdot\nabla\left(\sum_{j=1}^{n_{FE}}\delta\mathrm{u}_j^h\varphi_j(x)\right)\mathrm{d}x\\
&=\sum_{i=1}^{n_{FE}}\sum_{j=1}^{n_{FE}}c\mathrm{p}_i^h\int_\Omega\nabla\varphi_i(x)\cdot\nabla\varphi_j(x)\mathrm{d}x\delta\mathrm{u}_j^h\\
&=\left(\mathrm{p}^h\right)^T c\hat{\mathrm{S}}^h\delta\mathrm{u}^h.
\end{aligned}$$

Định nghĩa ma trận không đối xứng $\mathrm{BE}^h \in \mathbb{R}^{n_{FE}\times n_{FE}}$ bởi:

$$\mathrm{BE}^h_{ij} = \int_\Omega \varphi_i(x)\beta\cdot\nabla\varphi_j(x)\mathrm{d}x \text{ với } 1 \le i,j \le n_{FE}.$$

Ta được

$$\begin{aligned}\int_\Omega p^h\beta\cdot\nabla\delta u^h\,\mathrm{d}x &= \int_\Omega \sum_{i=1}^{n_{FE}} \mathrm{p}^h_i\varphi_i(x)\beta\cdot\nabla\left(\sum_{j=1}^{n_{FE}}\delta\mathrm{u}^h_j\varphi_j(x)\right)\mathrm{d}x\\ &= \sum_{i=1}^{n_{FE}}\sum_{j=1}^{n_{FE}} \mathrm{p}^h_i\int_\Omega \varphi_i(x)\beta\cdot\nabla\varphi_j(x)\mathrm{d}x\delta\mathrm{u}^h_j\\ &= \left(\mathrm{p}^h\right)^T\mathrm{BE}^h\delta\mathrm{u}^h.\end{aligned}$$

Hơn nữa, ta có:

$$\begin{aligned}\int_\Omega qp^h\delta u^h\,\mathrm{d}x &= \int_\Omega q\sum_{i=1}^{n_{FE}}\mathrm{p}^h_i\varphi_i(x)\sum_{j=1}^{n_{FE}}\delta\mathrm{u}^h_j\varphi_j(x)\\ &= q\sum_{i=1}^{n_{FE}}\sum_{j=1}^{n_{FE}}\mathrm{p}^h_i\int_\Omega\varphi_i(x)\varphi_j(x)\mathrm{d}x\delta\mathrm{u}^h_j = q\left(\mathrm{p}^h\right)^T\mathrm{M}^h\delta\mathrm{u}^h,\end{aligned}$$

và:

$$\begin{aligned}\int_\Gamma \sigma p^h\delta u^h\,\mathrm{d}s &= \int_\Gamma \sigma\sum_{i=1}^{n_{FE}}\mathrm{p}^h_i\varphi_i(x)\sum_{j=1}^{n_{FE}}\delta\mathrm{u}^h_j\varphi_j(x)\mathrm{d}s\\ &= \sigma\sum_{i=1}^{n_{FE}}\sum_{j=1}^{n_{FE}}\mathrm{p}^h_i\int_\Gamma\varphi_i(x)\varphi_j(x)\mathrm{d}s\delta\mathrm{u}^h_j = \sigma\left(\mathrm{p}^h\right)^T\mathrm{BD}^h\delta\mathrm{u}^h.\end{aligned}$$

Rời rạc theo phần tử hữu hạn của điều kiện tối ưu (3.15) được cho bởi:

$$\alpha\mathrm{BD}^h\left(\mathrm{u}^h - \mathrm{u}^h_\Gamma\right) + \left(c\hat{\mathrm{S}}^h + \left(\mathrm{BE}^h\right)^T + q\mathrm{M}^h + \sigma\mathrm{BD}^h\right)\mathrm{p}^h = 0. \quad (3.34)$$

Ta định nghĩa vectơ $\mathrm{f}^h \in \mathbb{R}^{n_{FE}}$ và $\mathrm{g}^h \in \mathbb{R}^{n_{FE}}$ bởi:

$$\mathrm{f}^h_i = \int_\Omega f(x)\varphi_i(x)\mathrm{d}x \text{ với } 1 \le i \le n_{FE},$$

và:

$$\mathrm{g}_i^h = \int_\Gamma g(x)\varphi_i(x)\mathrm{d}x \text{ với } 1 \le i \le n_{FE}.$$

Tương tự (3.33) và (3.34), ta áp dụng rời rạc theo phần tử hữu hạn cho điều kiện tối ưu (3.16) và được:

$$\left(c\hat{\mathrm{S}}^h + \mathrm{BE}^h + q\mathrm{M}^h + \sigma\mathrm{BD}^h\right)\mathrm{u}^h - \mathrm{f}^h - \mathrm{g}^h = 0. \qquad (3.35)$$

Tiếp theo ta mô tả phương pháp xấp xỉ POD Galerkin của các điều kiện tối ưu (3.14)-(3.16).

Các hàm cơ sở POD $\left\{\psi_i^h\right\}_{i=1}^{\ell}$ có thể viết thành tổ hợp tuyến tính của phần tử hữu hạn $\{\varphi_i\}_{i=1}^{n_{FE}}$, nghĩa là với $i \in \{1, \dots \ell\}$:

$$\psi_i^h(x) = \sum_{l=1}^{n_{FE}} \mathrm{U}_{li}\varphi_l(x).$$

Ma trận chứa các hệ số phần tử hữu hạn của cơ sở POD được kí hiệu bởi $\mathrm{U} = \Big(\left(\mathrm{U}_{ij}\right)\Big) \in \mathbb{R}^{n_{FE}\times\ell}$.

Ta xem xét chuẩn trong L^2 của các hàm u^ℓ và p^ℓ dựa trên cơ sở POD ta được:

$$\begin{aligned}\int_\Omega u^\ell(x)p^\ell(x)\mathrm{d}x &= \int_\Omega \sum_{i=1}^{\ell} \mathrm{u}_i^\ell\psi_i(x)\sum_{j=1}^{\ell}\mathrm{p}_j^\ell\psi_j(x)\mathrm{d}x\\ &= \sum_{i=1}^{\ell}\sum_{j=1}^{\ell}\mathrm{u}_i^\ell\int_\Omega\psi_i(x)\psi_j(x)\mathrm{d}x\mathrm{p}_j^\ell.\end{aligned}$$

Đặt:

$$\begin{aligned}\mathrm{M}_{ij}^\ell &= \int_\Omega \psi_i(x)\psi_j(x)\mathrm{d}x = \int_\Omega\sum_{l=1}^{n_{FE}}\sum_{k=1}^{n_{FE}}\mathrm{U}_{li}\varphi_l(x)\mathrm{U}_{kj}\varphi_k(x)\mathrm{d}x\\ &= \sum_{l=1}^{n_{FE}}\sum_{k=1}^{n_{FE}}\mathrm{U}_{li}\mathrm{U}_{kj}\int_\Omega\varphi_l(x)\varphi_k(x)\mathrm{d}x = \sum_{l=1}^{n_{FE}}\sum_{k=1}^{n_{FE}}\mathrm{U}_{li}\mathrm{U}_{kj}\mathrm{M}_{lk}^h\\ &= \left(\mathrm{U}^T\mathrm{M}^h\mathrm{U}\right)_{ij}.\end{aligned}$$

Do đó:

$$\mathrm{M}^{\ell} = \mathrm{U}^T \mathrm{M}^h \mathrm{U} \in \mathbb{R}^{\ell\times\ell}.$$

Tương tự ta tính các ma trận:

$$\mathrm{BD}^{\ell} = \mathrm{U}^T \mathrm{BD}^h \mathrm{U} \in \mathbb{R}^{\ell\times\ell},$$

$$\hat{\mathrm{S}}^{\ell} = \mathrm{U}^T \hat{\mathrm{S}}^h \mathrm{U} \in \mathbb{R}^{\ell\times\ell},$$

$$\mathrm{BE}^{\ell} = \mathrm{U}^T \mathrm{BE}^h \mathrm{U} \in \mathbb{R}^{\ell\times\ell}.$$

Và các vectơ:

$$\mathrm{f}^{\ell} = \mathrm{U}^T \mathrm{f}^h \in \mathbb{R}^{\ell},$$

và:

$$\mathrm{g}^{\ell} = \mathrm{U}^T\, \mathrm{g}^h \in \mathbb{R}^{\ell}.$$

Khi đó rời rạc POD của các điều kiện tối ưu (3.14)-(3.16) là:

$$\kappa\,(q - q_d) + \left(\mathrm{u}^{\ell}\right)^T \mathrm{M}^{\ell}\mathrm{p}^{\ell} - \lambda = 0, \tag{3.36}$$

$$\alpha\mathrm{BD}^{\ell}\left(\mathrm{u}^{\ell} - \mathrm{u}_{\Gamma}^{\ell}\right) + \left(c\hat{\mathrm{S}}^{\ell} + \left(\mathrm{BE}^{\ell}\right)^T + q\mathrm{M}^{\ell} + \sigma\mathrm{BD}^{\ell}\right)\mathrm{p}^{\ell} = 0, \tag{3.37}$$

và

$$\left(c\hat{\mathrm{S}}^{\ell} + \mathrm{BE}^{\ell} + q\mathrm{M}^{\ell} + \sigma\mathrm{BD}^{\ell}\right)\mathrm{u}^{\ell} - \mathrm{f}^{\ell} - \mathrm{g}^{\ell} = 0. \tag{3.38}$$

Lưu ý rằng các điều kiện tối ưu này thường có số chiều nhỏ hơn $(\ell \ll n_{FE})$ so với trong (3.33)-(3.35).

Sự rời rạc của Hessian được thực hiện tương tự như đối với các điều kiện tối ưu bậc nhất. Ta được Hessian:

$$\begin{pmatrix} \kappa & \mathrm{p}^T\mathrm{M} & \mathrm{u}^T\mathrm{M} \\ \mathrm{M}^T\mathrm{p} & \alpha\mathrm{BD} & (c\hat{\mathrm{S}} + \mathrm{BE} + q\mathrm{M} + \sigma\mathrm{BD})^T \\ \mathrm{M}^T\mathrm{u} & c\hat{\mathrm{S}} + \mathrm{BE} + q\mathrm{M} + \sigma\mathrm{BD} & 0 \end{pmatrix},$$

trong đó các ma trận M, $\hat{S}$, BD, BE và các vectơ u và p là đại diện cho những ma trận và vectơ phát sinh trong việc rời rạc liên quan đến cơ sở phần tử hữu hạn hoặc cơ sở POD. Chúng được thay thế bằng M^h, $\hat{S}^h$, BD^h , BE^h, u^h và p^h nếu ta đã làm việc với cơ sở phần tử hữu hạn và bởi M^ℓ, $\hat{S}^\ell$, BD^ℓ, BE^ℓ, u^ℓ, và p^ℓ nếu ta làm việc với cơ sở POD.

KẾT LUẬN VÀ KIẾN NGHỊ

Các kết quả nghiên cứu chính của luận văn bao gồm:

1. Trình bày về phương pháp phân tích trực giao chuẩn (POD) trong không gian vô hạn chiều.
2. Đưa ra xấp xỉ POD-Galerkin cho bài toán biên Robin của phương trình elliptic có tham số và ước lượng sai số của phương pháp.
3. Mô hình hóa bài toán xác định tham số dưới dạng bài toán điều khiển tối ưu và được xử lí bằng thuật toán Lagrange tăng cường kết hợp với phương pháp SQP toàn cục. Chúng tôi cũng trình bày cách thuật toán có thể rời rạc bởi cơ sở Galerkin phần tử hữu hạn hoặc POD để thấy sự ưu việt của phương pháp POD.

Dựa vào các kết quả đã đạt được, một số hướng phát triển của luận văn như sau:

1. Xem xét bài toán xác định tham số trong trường hợp không gian tham số nhiều chiều hơn.
2. Xem xét bài toán xác định tham số trong trường hợp tham số là hàm.

Tài liệu tham khảo

[1] G. Berkooz, P. Holmes, and J. L. Lumley. The proper orthogonal decomposition in the analysis of turbulent flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 25:539–575, 1993.

[2] K. Ito and K. Kunisch. Augmented Lagrangian-SQP methods for nonlinear optimalcontrol problems of tracking type. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 34:874–891, 1996.

[3] E. W. Sachs and S. Volkwein. Augmented Lagrange-SQP methods with Lipschitz-continuous Lagrange multiplier updates. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 40:233–253, 2002.

[4] T. Gänzler, S. Volkwein, and M. Weiser. SQP methods for parameter identification problems arising in hyperthermia. *Optimization Methods and Software*, 21:869 – 887, 2006.

[5] K. Ito and K. Kunisch. Augmented Lagrangian-SQP methods in Hilbert spaces and application to control in the coefficients problems. *SIAM Journal on Optimization*, 6:96–125, 1996.

[6] M. Kahlbacher and S. Volkwein. Galerkin proper orthogonal decomposition methods for parameter dependent elliptic systems. *Discus-*

siones Mathematicae. Differential Inclusions, Control and Optimization, 27:95–117, 2007.

[7] L. Machiels, Y. Maday, and A. T. Patera. Output bounds for reduced-order approximations of elliptic partial differential equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190:3413–3426, 2001.

[8] M. Kahlbacher and S. Volkwein. Model reduction by proper orthogonal decomposition for estimation of scalar parameters in elliptic PDEs. *Proceedings of European Conference on Computational Fluid Dynamics (ECCOMAS CFD), P. Wesseling, E. Onate, and J. Periaux (eds.)*, Egmont aan Zee, Netherlands, 2006.

[9] S. Volkwein, M. Kahlbacher, K. Kunisch, and F. Tröltzsch. *Proper Orthogonal Decomposition : Applications in Optimization and Control*. Lecture Notes: [Online]. Available: math.uni-konstanz.de, Konstanz, Germany, 2008.

[10] K. Yoshida. *Funtional Analysis*. Springer Verlag, Berlin Heidelberg, 1980.

[11] S. Volkwein. Optimal control of a phase-field model using proper orthogonal decomposition. *Z. Angew. Math. Mech*, 81:83–97, 2001.

[12] T. Kato. *Perturbation Theory for Linear Operators*. Springer Verlag, Berlin, 1980.

[13] D. P. Bertsekas. *Nonlinear Programming*. Athena Scientific, Belmont, Mass, 1995.

[14] J. Nocedal and S. J. Wright. *Numerical Optimization*. Springer, New York, NY, USA, 2e edition, 2006.

[15] H. Maurer and J. Zowe. First and second-order necessary and sufficient optimality conditions for infinite-dimensional programming problems. *Mathematical Programming*, 16:98–110, 1979.

[16] M. Hintermueller. On a globalized augmented Lagrangian SQP-algorithm for nonlinear optimal control problems with box constraints. *Fast Solution Methods for Discretized Optimization Problems*, 138:139–153, 2001.

[17] A. C. Antoulas, D. C. Sorensen, and S. Gugercin. A survey of model reduction methods for large-scale systems. *Structured matrices in mathematics, computer science, and engineering I*, 280:193–219, 2004.

[18] J. A. Atwell and B. B. King. Reduced order controllers for spatially distributed systems via proper orthogonal decomposition. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 26(1):128–151, 2004.

[19] K. Kunisch and S. Volkwein. Galerkin proper orthogonal decomposition methods for a general equation in fluid dynamics. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 40:492–515, 2002.

[20] K. Kunisch and S. Volkwein. Galerkin proper orthogonal decomposition methods for parabolic problems. *Numerische Mathematik*, 90:117–148, 2001.

[21] J. Nocedal and S. J. Wright. *Numerical Optimization*. Springer Verlag, Berlin, 1999.

[22] K. Pearson. LIII. On lines and planes of closest fit to systems of points in space. *Philosophical Magazine Series 1*, 2:559–572, 2010.

[23] L. Sirovich. Turbulence and the dynamics of coherent structures, parts I-III. *Quarterly of Applied Mathematics*, 45:561–590, 1987.

[24] L. Qi and F. Sun. A nonsmooth version of Newton's method. *Mathematical Programming*, 58:353–367, 1993.

[25] L. C. Evans. *Partial Differential Equations*. American Mathematical Society, Providence, R.I, 2010.