Einführung in die Numerische Mathematik

Sommersemester 2019

Prof. Dr. Ira Neitzel
Fabian Hoppe

UNIVERSITÄT BONN

Übungsblatt 7

Abgabe am 23. Mai vor der Vorlesung

Aufgabe 1. (2 + 2 + 2 = 6 Punkte)

Wir betrachten das quadratische Optimierungsproblem

$$\min_x f(x) := \frac{1}{2} x^T H x + c^T x \qquad \text{sodass} \quad h(x) := b^T x = 0$$

mit einer symmetrisch positiv definiten Matrix $H \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $c \in \mathbb{R}^n$ und $b \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$. Anhand dieses Beispielproblems wollen wir in dieser Aufgabe die in der Vorlesung behandelte Theorie zum Penalty-Verfahren illustrieren.

a) Geben Sie *explizit* die Lösung $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ dieses Optimierungsproblems und den zugehörigen Lagrangemultiplikator $\bar{\mu}$ an.

b) Sei nun $\alpha > 0$. Berechnen Sie

$$\bar{x}_\alpha := \operatorname*{argmin}_{x\in\mathbb{R}^n} p_\alpha(x) := f(x) + \frac{\alpha}{2} h(x)^2$$

und bestätigen Sie damit die in der Vorlesung bewiesenen Grenzwerte:

$$\bar{x} = \lim_{\alpha\longrightarrow\infty} \bar{x}_\alpha, \qquad \bar{\mu} = \lim_{\alpha\longrightarrow\infty} \alpha h(\bar{x}_\alpha).$$

Hinweis: Sie dürfen ohne Beweis die Sherman-Morrison-Woodbury-Formel benutzen:

$$(A + uv^T)^{-1} = A^{-1} - \frac{A^{-1}uv^TA^{-1}}{1 + v^TA^{-1}u}, \qquad A \in \mathbb{R}^{n\times n} \text{ invertierbar}, u, v \in \mathbb{R}^n \text{ sodass } 1 + v^TA^{-1}u \neq 0.$$

c) Berechnen Sie die Hessematrix $\nabla^2 p_\alpha(\bar{x}_\alpha)$. Wie verhält sich die Kondition dieser Matrix für $\alpha \longrightarrow \infty$?

Aufgabe 2. (4 Punkte)

Sei $k \in \mathbb{N}$ und $y_0, \dots, y_{k-1} \in \mathbb{R}$. Schreiben Sie die gewöhnliche Differentialgleichung

$$y^{(k)} = \sin(y)y, \qquad y(0) = y_0, \quad y'(0) = y_1, \quad \dots, \quad y^{(k-1)}(0) = y_{k-1},$$

in der Form

$$w' = b(w)w, \qquad w(0) = w_0,$$

mit einem $b : \mathbb{R}^k \longrightarrow \mathbb{R}^{k\times k}$ und $w_0 \in \mathbb{R}^k$.
Zeigen Sie damit Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung $y : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$.

Aufgabe 3. (2 + 2 + 2 = 6 Punkte)

In der Vorlesung wurde das SQP-Verfahren zur Lösung nichtlinearer Optimierungsprobleme mit Nebenbedingungen eingeführt. Zur praktischen Umsetzung dieses Verfahrens benötigt man einen effizienten Löser für die im SQP-Verfahren auftretenden quadratischen Teilprobleme. In dieser Aufgabe behandeln wir ein solches Verfahren, das sog. *Aktive-Mengen-Verfahren (Active set strategy)*.

Gegeben sei ein quadratisches Problem der Form

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^n} \quad & f(x) := \frac{1}{2} x^T H x + c^T x \\ & a_i \leq x_i \leq b_i \quad \text{für } i = 1, \dots, n, \end{aligned} \tag{P}$$

mit einer symmetrisch positiv definiten Matrix $H \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und Vektoren $a, b, c \in \mathbb{R}^n$ mit $a_i < b_i$ für $i = 1, \dots, n$. Das Aktive-Mengen-Verfahren besteht nun aus folgenden Schritten:

(1) Finde Anfangsnäherung $x^0 \in \mathbb{R}^n$, setze $k = 0$.

(2) Ermittle die aktiven Indizes $\mathcal{A}(x^k) := \{i \in \{1, \dots, n\} : x_i^k = a_i \text{ oder } x_i^k = b_i\}$.

(3) Berechne $\tilde{x}^{k+1}$ als Lösung von

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \qquad \text{sodass} \quad x_i = x_i^k \quad \text{für alle } i \in \mathcal{A}(x^k). \tag{P_k}$$

(4) Führe einen projizierten Gradientenschritt durch:

$$x^{k+1} := P_C\left(\tilde{x}^{k+1} - \rho \nabla f(\tilde{x}^{k+1})\right),$$

wobei P_C die Projektion auf die zulässige Menge $C := \{x \in \mathbb{R}^n : a \leq x \leq b\}$ ist.

(5) Falls $\|x^{k+1} - x^k\|_2$ oder $\|x^{k+1} - \tilde{x}^{k+1}\|_2$ hinreichend klein ist oder $\mathcal{A}(x^{k+1}) = \mathcal{A}(x^k)$ und $x_i^{k+1} = x_i^k$ für $i \in \mathcal{A}(x^{k+1}) = \mathcal{A}(x^k)$ gilt, breche die Iteration ab.

Ansonsten setzte $k = k + 1$ und gehe zu Schritt (2).

a) Überführen Sie das Optimierungsproblem (P_k) in ein quadratisches Optimierungsproblem ohne Nebenbedingungen

$$\min_{\tilde{x} \in \mathbb{R}^{n - \#\mathcal{A}(x^k)}} \frac{1}{2} \tilde{x}^T \tilde{H} \tilde{x} + \tilde{c}^T \tilde{x},$$

wobei in der Variablen $\tilde{x}$ gerade die $(n - \#\mathcal{A}(x^k))$-vielen Komponenten von x untergebracht sind, die nicht in der aktiven Menge $\mathcal{A}(x^k)$ liegen.

Geben Sie eine analytische Lösung diesen reduzierten Problems an.

b) Sei nun $\bar{x}$ die Lösung von (P). Zeigen Sie: Die Lösung x^{k+1} von (P_k) mit $x^k = \bar{x}$ ist zulässig und es gilt $x^{k+1} = \bar{x}$.

Bemerkung: Damit ist folgender Sachverhalt gezeigt: Stimmt die aktive Menge der aktuellen Iterierten x^k mit der aktiven Menge der Lösung überein und nimmt x^k dort auch dieselben Werte an wie $\bar{x}$, dann konvergiert das Aktive-Mengen-Verfahren von x^k aus in einem Schritt.

c) Beweisen Sie: Nach Schritt (3) des Verfahrens gilt $(\nabla f(\tilde{x}^{k+1}))_i = 0$ für $i \notin \mathcal{A}(x^k)$. Gilt ferner $\mathcal{A}(x^k) = \mathcal{A}(x^{k+1})$ und $x_i^k = x_i^{k+1}$ für $i \in \mathcal{A}(x^k)$, dann ist x^{k+1} die Lösung von (P).

Das Aktive-Mengen-Verfahren konvergiert nach endlich vielen Schritten. Beweisidee: Man zeigt, dass sich die aktiven Mengen niemals wiederholen, wenn die Lösung noch nicht erreicht wurde. Da es nur endlich viele verschiedene aktive Mengen gibt, muss das Verfahren also nach endlich vielen Schritten erfolgreich abbrechen.

Aufgabe 4. (4 Punkte)

Wir betrachten in dieser Aufgabe das Optimierungsproblem

$$\begin{aligned} \min \ \frac{1}{2}(y-y_d)^T M(y-y_d) + \frac{\gamma}{2}u^T M u, \\ Ay + y^3 - u = 0, \\ a \le u \le b, \end{aligned} \tag{OCP}$$

mit $A = \frac{1}{h^2}\operatorname{tridiag}(-1,2,-1)$, $M = \operatorname{diag}(h/2, h, ..., h, h/2) \in \mathbb{R}^N$, $N \in \mathbb{N}$, $h = 1/(N-1)$, $\gamma > 0$.
Hierbei schreiben wir kurz y^3 für die komponentenweisen dritten Potenzen eines Vektors $y \in \mathbb{R}^N$, d.h. $y^3 := (y_1^3, ..., y_N^3)^T \in \mathbb{R}^N$.

Hintergrundinformation: Für $y_{d,i} := y_d(x_i)$, $a_i = a(x_i)$, $b_i = b(x_i)$ kann dieses Problem als Finite-Differenzen-Approximation des unendlich-dimensionalen Optimierungsproblems

$$\begin{aligned} \min \frac{1}{2}\|y-y_d\|^2_{L^2(0,1)} + \frac{\gamma}{2}\|u\|^2_{L^2(0,1)} \\ -y'' + y^3 - u = 0, \\ y'(0) = y'(1) = 0, \\ a \le u \le b, \end{aligned}$$

aufgefasst werden. Diese Interpretation ist aber zum Verständnis dieser Aufgabe nicht notwendig.

Wie schon in früheren Aufgaben kann diese Problem als Optimierungsproblem in der Variablen $x = (y, u) \in \mathbb{R}^{N+N}$ aufgefasst werden.
Geben Sie die SQP-Teilprobleme zur Lösung von (OCP) an.

Programmieraufgabe 1. (20 Punkte)

Abgabe der Programmieraufgabe in der Woche 27. bis 31. Mai