

Grundlegende Variationelle Methoden mit Anwendungen aus der Bildverarbeitung

Stephen Keeling
Institut für Mathematik
Universität Graz, Graz, Austria

Literatur:

P.E. Gill, W. Murray, M.H. Wright, *Practical Optimization*.

H. Amann, J. Escher, *Analysis II*.

I.M. Gelfand, S.V. Fomin, *Calculus of Variations*.

D.G. Luenberger, *Optimization by Vector Space Methods*.

Beispiel: Sei $f \in C^2(\mathbf{R}^2, \mathbf{R})$ und

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbf{R}^2} f(\mathbf{x}), \quad f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x}\|^2 = x_1^2 + x_2^2.$$

Notwendige Optimalitätsbedingung:

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} f_{x_1} \\ f_{x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2x_1 \\ 2x_2 \end{bmatrix} \quad \partial f(\mathbf{x})[\mathbf{h}] = \nabla f(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{h}$$

$$0 = \partial f(\mathbf{x}^*)[\mathbf{h}] = 2\mathbf{x}^* \cdot \mathbf{h}, \quad \forall \mathbf{h} \in \mathbf{R}^2 \Rightarrow \mathbf{x}^* = \mathbf{0}$$

Hinreichende Optimalitätsbedingung:

$$H_f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} f_{x_1x_1} & f_{x_1x_2} \\ f_{x_2x_1} & f_{x_2x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \quad \partial^2 f(\mathbf{x})[\mathbf{h}, \mathbf{k}] = \mathbf{h} \cdot H_f(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{k}$$

$$\partial^2 f(\mathbf{x}^*)[\mathbf{h}]^2 = \mathbf{h} \cdot [2I] \cdot \mathbf{h} = 2\|\mathbf{h}\|^2 > 0 \Rightarrow f(\mathbf{x}^*) = \min.$$

Basis der Bedingungen und Lösungsmethoden.

Sei $J \in C^2(H, \mathbf{R})$ und

$$\min_{u \in H} J(u).$$

Nimm an: $J(u^*) = \min_{u \in H} J(u)$. Taylorsatz: $v \in H$,

$$J(u^* + v) = J(u^*) + \partial J(u^*)[v] + \frac{1}{2} \partial^2 J(u^*)[v]^2 + \sigma \|v\|_H^2$$

wobei $\sigma \rightarrow 0$ für $\|v\|_H \rightarrow 0$.

Nimm an:

$$\partial J(u^*)[-\hat{v}] < 0 < \partial J(u^*)[\hat{v}].$$

Wenn $|\varepsilon|$ klein genug ist, gilt

$$\varepsilon^{-1} [J(u^* + \varepsilon \hat{v}) - J(u^*)] = \partial J(u^*)[\hat{v}] + \sigma |\varepsilon| > 0.$$

Dann folgt Widerspruch:

$$\begin{aligned} \varepsilon > 0 &\Rightarrow J(u^* + \varepsilon \hat{v}) > J(u^*) \\ \varepsilon < 0 &\Rightarrow J(u^* + \varepsilon \hat{v}) < J(u^*). \end{aligned}$$

Also notwendige (1.Ordnung) Optimalitätsbedingungen:

$$\partial J(u^*)[v] = D_v J(u^*) = 0, \quad \forall v \in H.$$

Nimm an:

$$\partial^2 J(u^*)[\hat{v}]^2 < 0.$$

Da $\partial J(u^*)[v] = 0$ gilt, folgt:

$$J(u^* + v) = J(u^*) + \frac{1}{2} \partial^2 J(u^*)[v]^2 + \sigma \|v\|_H^2.$$

Wenn $|\varepsilon|$ klein genug ist, gilt

$$2\varepsilon^{-2} [J(u^* + \varepsilon \hat{v}) - J(u^*)] = \partial^2 J(u^*)[\hat{v}]^2 + \sigma |\varepsilon| < 0.$$

Dann folgt Widerspruch:

$$J(u^* + \varepsilon \hat{v}) < J(u^*), \quad \forall \varepsilon \text{ klein genug.}$$

Also notwendige (2.Ordnung) Optimalitätsbedingungen:

$$\partial^2 J(u^*)[v]^2 \geq 0, \quad \forall v \in H.$$

Nimm an: (Koerzivität)

$$\exists \alpha > 0 \text{ s.d. } \partial^2 J(u^*)[v]^2 \geq \alpha \|v\|_H^2, \quad \forall v \in H.$$

Da $\partial J(u^*)[v] = 0$ gilt, folgt:

$$J(u^* + v) = J(u^*) + \frac{1}{2} \partial^2 J(u^*)[v]^2 + \sigma \|v\|_H^2$$

Nimm $\|v\|_H$ klein genug, s.d. $|\sigma| \leq \alpha/4$,

$$J(u^* + v) - J(u^*) \geq \frac{1}{2} \alpha \|v\|_H^2 - \frac{1}{4} \alpha \|v\|_H^2 > 0.$$

Also hinreichende (2.Ordnung) Optimalitätsbedingungen:

$$\partial^2 J(u^*)[v]^2 \geq \alpha \|v\|_H^2, \quad \forall v \in H.$$

Äquivalent in endlich dimensionalen Räumen:

$$\partial^2 J(u^*)[v]^2 > 0, \quad \forall v \in H.$$

Existenz und Eindeutigkeit.

Sei $J : Y \subset X \rightarrow \mathbf{R}$

- koerziv auf Y , oder $J(u) \rightarrow \infty$ für $\|u\|_Y \rightarrow \infty$, und
- von unten halbstetig auf X , oder $J(u) \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} J(u_n)$
wenn $\|u - u_n\|_X \rightarrow 0$.

Wenn Y kompakt eingebettet in X wird, gibt es ein Minimum $u^* \in X$ für J . Wenn J streng konvex ist, ist das Minimum eindeutig.

Minimierende Folge $\{u_n\} \subset Y$.

- Y -Koerzivität $\Rightarrow \{u_n\}$ Y -beschränkt.
- $Y \xrightarrow{k} X \Rightarrow \exists \{u_{n'}\}$ und $u^* \in X$, so daß $u_n \xrightarrow{X} u^*$.
- Halbstetigkeit von unten $\Rightarrow J(u^*) \leq J(u_{n'})$.
- Strenge Konvexität $\Rightarrow J[(u_1^* + u_2^*)/2] < \frac{1}{2}[J(u_1^*) + J(u_2^*)] = J_{\min}$.

Zusammenfassung der Definitionen.

Richtungsableitung:

$$D_v J(u) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{J(u + \varepsilon v) - J(u)}{\varepsilon}$$

Ableitung: $\partial J(u) \in \mathcal{L}(H, \mathbf{R})$ (linear, stetig/beschränkt)

$$\lim_{\|v\|_H \rightarrow 0} \frac{|J(u + v) - J(u) - \partial J(u)[v]|}{\|v\|_H} = 0.$$

Satz: J differenzierbar in $u^* \Rightarrow D_v J(u^*)$ existieren $\forall v \in H$ und $D_v J(u^*) = \partial J(u^*)[v]$.

Satz: $\partial J(u^*) \in \mathcal{L}(H, \mathbf{R})$ (H Hilbert) $\Rightarrow \exists g \in H$ (Rieszsche Darstellung) s.d. $D_v J(u^*) = \partial J(u^*)[v] = \langle g, v \rangle_H$. (“ $g = \nabla J$ ”)

Höhere Ableitungen:

$$\partial^m J(u) \in \mathcal{L}^m(H, \mathbf{R}), \quad \mathcal{L}^m = \mathcal{L}(H, \mathcal{L}^{m-1}(H, \mathbf{R})),$$

$$\lim_{\|v\|_H \rightarrow 0} \frac{\|\partial^{m-1} J(u+v) - \partial^{m-1} J(u) - \partial^m J(u)[v]\|_{\mathcal{L}^{m-1}(H, \mathbf{R})}}{\|v\|_H} = 0.$$

$$\|A\|_{\mathcal{L}(B, C)} = \sup_{u \in B} \frac{\|Au\|_C}{\|u\|_B}$$

$$\partial^m J(u)[v_1, \dots, v_m] = \partial(\dots(\partial(\partial J(u)[v_1])[v_2] \dots)[v_m]$$

Tayloratz: $u, v \in H$,

$$J(u+v) = \sum_{k=0}^m \frac{1}{k!} \partial^k J(u)[v]^k + \sigma \|v\|_H^m$$

wobei $\sigma \rightarrow 0$ für $\|v\|_H \rightarrow 0$.

Beispiel. Finde die Kurve u^* mit kleinster Länge zwischen zwei Punkten.

Eingeschränktes Problem:

$$\min_{w \in C^1[0,1]} J(w) \quad \text{s.d.} \quad w(0) = 0, \quad w(1) = 1.$$

wobei die Länge so gegeben wird:

$$J(w) = \int_0^1 \sqrt{1 + [w'(x)]^2} dx.$$

Die Menge $\{w \in C^1[0,1] : w(0) = 0, w(1) = 1\}$ ist kein Vektorraum. Randbedingungen sind Einschränkungen – später.

Nicht eingeschränktes Problem: $w = x + u, u(0) = 0 = u(1)$

$$\min_{u \in C_0^1[0,1]} J(u), \quad J(u) = \int_0^1 \sqrt{1 + [1 + u'(x)]^2} dx.$$

Die Menge $C_0^1[0,1] = \{u \in C^1[0,1] : u(0) = 0, u(1) = 0\}$ ist ein (Banach) Vektorraum.

Notwendige Optimalitätsbedingung: $D_v J(u^*) = 0, \forall v \in C_0^1[0,1]$.

$$\begin{aligned}
D_v J(u) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{J(u + \varepsilon v) - J(u)}{\varepsilon} \\
&= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_0^1 \frac{\sqrt{1 + [1 + u'(x) + \varepsilon v'(x)]^2} - \sqrt{1 + [1 + u'(x)]^2}}{\varepsilon} dx \\
&= \dots = \int_0^1 \frac{[1 + u'(x)]v'(x)}{\sqrt{1 + [1 + u'(x)]^2}} dx.
\end{aligned}$$

Wenn u^* genügend glatt ist, gilt

$$\begin{aligned}
D_v J(u^*) &= \frac{1 + u^{*\prime}(x)}{\sqrt{1 + [1 + u^{*\prime}(x)]^2}} \underbrace{v(x)}_{=0} \Bigg|_{x=0}^{x=1} \\
&\quad - \int_0^1 v(x) \left(\frac{1 + u^{*\prime}(x)}{\sqrt{1 + [1 + u^{*\prime}(x)]^2}} \right)' dx.
\end{aligned}$$

Wenn $v(x) \rightarrow \delta(x - \hat{x})$, $\hat{x} \in (0, 1)$, $D_v J(u^*) = 0 \Rightarrow$

$$\left(\frac{1 + u^{*\prime}(x)}{\sqrt{1 + [1 + u^{*\prime}(x)]^2}} \right)' = 0, \quad x \in (0, 1).$$

Die allgemeine Lösung:

$$\left(\frac{1 + u^{*\prime}(x)}{\sqrt{1 + [1 + u^{*\prime}(x)]^2}} \right) = k_1 \Rightarrow u^{*\prime}(x) = k_2 \Rightarrow u^*(x) = k_2 x + k_3$$

Die Randbedingungen $u \in C_0^1[0, 1] \Rightarrow u^*(x) = 0$.

Das heisst, $w^*(x) = x + u^*(x) = x$ gibt eine Gerade.

Auch notwendig: $\partial J(u^*)[v] = 0, \forall v \in C_0^1[0, 1]$.

J differenzierbar $\Rightarrow \partial J(u^*)[v] = D_v J(u^*) = 0, \forall v \in C_0^1[0, 1]$.

J differenzierbar?

$$\lim_{\|v\|_{C_0^1} \rightarrow 0} \frac{|J(u+v) - J(u) - \partial J(u)[v]|}{\|v\|_{C_0^1}} = 0?$$

wobei:

$$\|v\|_{C_0^1} = \sup_{x \in [0,1]} |v'(x)|, \quad \|v\|_{C^1} = \sup_{x \in [0,1]} |v(x)| + \sup_{x \in [0,1]} |v'(x)|$$

die auf $C_0^1[0, 1]$ äquivalent sind.

Aufgabe: Zeige ja, und daher gilt $\partial J(u^*)[v] = D_v J(u^*) = 0, \forall v \in C_0^1[0, 1]$.

Hinweis: Wenn $J(u) = \int F(u')$ gilt, folgt

$$J(u+v) - J(u) = \int [F(u'+v') - F(u')] = \int [F'(u')v' + \sigma|v'|].$$

wobei $\sigma \rightarrow 0$ für $|v'| \rightarrow 0$.

Auch notwendig: $\partial^2 J(u^*)[v]^2 \geq 0, \forall v \in C_0^1[0, 1]$.

$$D_w D_v J(u) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{D_v J(u + \varepsilon w) - D_v J(u)}{\varepsilon}$$

$$= \dots = \int_0^1 \frac{v'(x)w'(x)}{[1 + [1 + u'(x)]^2]^{\frac{3}{2}}} dx$$

$J(u)$ zweimal differenzierbar $\Rightarrow \partial^2 J(u)[v, w] = D_w D_v J(u), \forall v, w \in C_0^1[0, 1]$.

$J(u)$ zweimal differenzierbar?

$$\lim_{\|v\|_{C_0^1} \rightarrow 0} \frac{\|\partial J(u+v) - \partial J(u) - \partial^2 J(u)[v]\|_{\mathcal{L}(C_0^1, \mathbf{R})}}{\|v\|_{C_0^1}} = 0?$$

Aufgabe: Zeige ja, und daher gilt $\partial^2 J(u)[v, w] = D_w D_v J(u)$, $\forall v, w \in C_0^1[0, 1]$.

Daher folgt

$$\begin{aligned} \partial^2 J(u^*)[v]^2 &= D_v^2 J(u^*) = \int_0^1 \frac{v'(x)^2}{[1 + [1 + u'(x)]^2]^{\frac{3}{2}}} dx \\ &= 2^{-\frac{3}{2}} \int_0^1 [v'(x)]^2 dx \geq 0 \end{aligned}$$

Hinreichend: $\partial^2 J(u^*)[v]^2 \geq \alpha \|v\|_{C_0^1}^2$, $\forall v \in C_0^1[0, 1]$.

$$\partial^2 J(u^*)[v]^2 = 2^{-\frac{3}{2}} \int_0^1 [v'(x)]^2 dx \geq \alpha \|v\|_{C_0^1}^2 = \alpha \sup_{x \in [0, 1]} |v'(x)|^2$$

Nein! Aber es gilt

$$\partial^2 J(u^*)[v]^2 \geq \alpha \|v\|_{H_0^1}^2, \quad \forall v \in H_0^1[0, 1] \quad (\alpha = 2^{-\frac{3}{2}})$$

wobei

$$\|v\|_{H_0^1}^2 = \int_0^1 [v'(x)]^2 dx \quad \|v\|_{H^1}^2 = \int_0^1 \{[v(x)]^2 + [v'(x)]^2\} dx$$

die äquivalent auf $H_0^1[0, 1]$ sind.

Also natürliche Frage: Warum nicht mit $H_0^1[0, 1]$ statt $C_0^1[0, 1]$ arbeiten?

Aufgabe: Zeige ja, alle obigen Behauptungen gelten ebensogut mit $H_0^1[0, 1]$, z.B. gilt

$$\lim_{\|v\|_{H_0^1} \rightarrow 0} \frac{|J(u+v) - J(u) - \partial J(u)[v]|}{\|v\|_{H_0^1}} = 0.$$

Zusammenfassung:

- Notwendige $D_v J(u^*) = 0$ liefert einen Kandidaten u^* ,
- Notwendige $D_v J(u^*) = 0$ leicht zu zeigen,
- Notwendige $\partial J(u^*)[v] = 0$ folgt, wenn J in u^* glatt ist,
- Notwendige $\partial^2 J(u^*)[v]^2 \geq 0$ schwieriger zu zeigen,
- Hinreichende $\partial^2 J(u^*)[v]^2 \geq \alpha \|v\|_H^2$ noch schwieriger zu zeigen.

Beispiel. Sei $\tilde{u} \in L^2[0, 1]$ verrauscht und finde $u \in H^1[0, 1]$ eine entrauschte Abschätzung.

Formulierung:

$$\min_{u \in H^1} J(u), \quad J(u) = \int_0^1 [u(x) - \tilde{u}(x)]^2 dx + \mu \int_0^1 [u'(x)]^2 dx$$

$$\mu \rightarrow 0 \Rightarrow u^* \rightarrow \tilde{u}. \quad \mu \rightarrow \infty \Rightarrow u^* \rightarrow \int_0^1 \tilde{u}(x) dx.$$

Notwendige Optimalitätsbedingung: $D_v J(u^*) = 0, \forall v \in H^1[0, 1]$.

$$\begin{aligned} D_v J(u) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{J(u + \varepsilon v) - J(u)}{\varepsilon} \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \int_0^1 \{ [u(x) + \varepsilon v(x) - \tilde{u}(x)]^2 - [u(x) - \tilde{u}(x)]^2 \} dx \\ &\quad + \frac{\mu}{\varepsilon} \int_0^1 \{ [u'(x) + \varepsilon v'(x)]^2 - [u'(x)]^2 \} dx \end{aligned}$$

$$= \dots = 2 \int_0^1 [u(x) - \tilde{u}(x)] v(x) dx + 2\mu \int_0^1 u'(x) v'(x) dx$$

Wenn u^* genügend glatt ist, gilt

$$\begin{aligned} D_v J(u^*) &= 2 \int_0^1 [u^*(x) - \tilde{u}(x)] v(x) dx \\ &\quad + 2\mu u^{*'}(x) v(x) \Big|_{x=0}^{x=1} - 2\mu \int_0^1 v(x) u^{*''}(x) dx. \end{aligned}$$

Wenn $v \rightarrow 1$ am Rand und 0 sonst, oder $v(x) \rightarrow \delta(x - \hat{x})$,
 $\hat{x} \in (0, 1)$, $D_v J(u^*) = 0 \Rightarrow$

$$\begin{cases} -\mu u^{*''} + u^* = \tilde{u}, & 0 < x < 1 \\ u^{*'} = 0, & x = 0, 1 \end{cases}$$

Charakterisierung von u^* .

$$\mu \rightarrow 0 \Rightarrow u^* \rightarrow \tilde{u}. \quad \mu \rightarrow \infty \Rightarrow u^* \rightarrow \int_0^1 \tilde{u}(x) dx.$$

Auch notwendig: $\partial J(u^*)[v] = 0, \forall v \in H^1[0, 1]$.

J differenzierbar $\Rightarrow \partial J(u^*)[v] = D_v J(u^*) = 0, \forall v \in H^1[0, 1]$.

J differenzierbar?

$$\lim_{\|v\|_{H^1} \rightarrow 0} \frac{|J(u+v) - J(u) - \partial J(u)[v]|}{\|v\|_{H^1}} = 0?$$

wobei:

$$\|v\|_{H^1}^2 = \int_0^1 \{[v(x)]^2 + [v'(x)]^2\} dx$$

Aufgabe: Zeige ja, und daher gilt $\partial J(u^*)[v] = D_v J(u^*) = 0, \forall v \in H^1[0, 1]$.

Auch notwendig: $\partial^2 J(u^*)[v]^2 \geq 0, \forall v \in H^1[0, 1]$.

$$D_w D_v J(u) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{D_v J(u + \varepsilon w) - D_v J(u)}{\varepsilon}$$

$$= \dots = 2 \int_0^1 w(x)v(x) dx + 2\mu \int_0^1 w'(x)v'(x) dx$$

$J(u)$ zweimal differenzierbar $\Rightarrow \partial^2 J(u)[v, w] = D_w D_v J(u), \forall v, w \in H^1[0, 1]$.

$J(u)$ zweimal differenzierbar?

$$\lim_{\|v\|_{H^1} \rightarrow 0} \frac{\|\partial J(u+v) - \partial J(u) - \partial^2 J(u)[v]\|_{\mathcal{L}(H^1, \mathbf{R})}}{\|v\|_{H^1}} = 0?$$

Aufgabe: Zeige ja, und daher gilt $\partial^2 J(u)[v, w] = D_w D_v J(u)$, $\forall v, w \in H^1[0, 1]$.

Daher folgt

$$\begin{aligned} \partial^2 J(u^*)[v]^2 &= D_v^2 J(u^*) = 2 \int_0^1 [v(x)]^2 dx + 2\mu \int_0^1 [v'(x)]^2 dx \\ &\geq 2 \min\{1, \mu\} \|v\|_{H^1}^2 \end{aligned}$$

Hinreichend! $\partial^2 J(u^*)[v]^2 \geq \alpha \|v\|_{H^1}^2$, $\forall v \in H^1[0, 1]$.

Numerische Methoden.

Diskretisiere

$$0 = \frac{1}{2} D_v J(u) = B(u, v) - F(v), \quad \forall v \in H^1[0, 1]$$

$$B(u, v) = \int_0^1 [u(x)v(x) + \mu u'(x)v'(x)] dx$$

$$F(v) = \int_0^1 \tilde{u}(x)v(x) dx$$

mit finiten Elementen ($S_h = \text{span}$ von Dachfunktionen),

$$B(u_h, \chi) = F(\chi) \quad \forall \chi \in S_h \subset H^1[0, 1]$$

oder mit finiten Differenzen für

$$\begin{cases} -\mu u'' + u = \tilde{u}, & 0 < x < 1 \\ u' = 0, & x = 0, 1 \end{cases}$$

oder minimiere ($h = 1/n$, $x_i = ih$, $U_i \approx u(x_{i-\frac{1}{2}})$)

$$J_h(U) = h \sum_{i=1}^n [U_i - \tilde{U}_i]^2 + h\mu \sum_{i=1}^{n-1} \left[\frac{U_{i+1} - U_i}{h} \right]^2$$

Optimiere dann diskretisiere, oder diskretisiere dann optimiere?

Fast niemals die selbe Diskretisierung! Wichtige Unterschiede im allgemeinen, aber hier keine!

Aufgabe: Zeige $\nabla J_h(U^*) = 0 \Rightarrow$

$$[-\mu\Delta_h + I]U^* = \tilde{U}, \quad -\Delta_h = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} 1 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 1 \end{bmatrix}$$

und $U^* \rightarrow u^*$ für $n \rightarrow \infty$.

Beispiel. Sei $\tilde{u} \in L^2[0, 1]$ verrauscht und finde $u \in H^1[0, 1]$ eine entrauschte Abschätzung mit scharfen Kanten.

Quadratische Strafe zu dissipativ. Neue Formulierung:

$$\min_{u \in H^1} J(u), \quad J(u) = \int_0^1 [u(x) - \tilde{u}(x)]^2 dx + \int_0^1 \phi(u'(x)^2) dx$$

wobei $s \mapsto \phi(s^2)$ konvex ist.

Notwendige Optimalitätsbedingung: $D_v J(u^*) = 0, \forall v \in H^1[0, 1]$.

$$\begin{aligned} D_v J(u) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{J(u + \varepsilon v) - J(u)}{\varepsilon} \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \int_0^1 \{ [u(x) + \varepsilon v(x) - \tilde{u}(x)]^2 - [u(x) - \tilde{u}(x)]^2 \} dx \\ &\quad + \frac{1}{\varepsilon} \int_0^1 \{ \phi([u'(x) + \varepsilon v'(x)]^2) - \phi([u'(x)]^2) \} dx \\ &= 2 \int_0^1 [u(x) - \tilde{u}(x)] v(x) dx + 2 \int_0^1 \phi'(u'(x)^2) u'(x) v'(x) dx \end{aligned}$$

Wenn u^* genügend glatt ist, gilt

$$\begin{aligned} D_v J(u^*) &= 2 \int_0^1 [u^*(x) - \tilde{u}(x)] v(x) dx \\ &\quad + 2\phi'(u^{*'}(x)^2) u^{*'}(x) v(x) \Big|_{x=0}^{x=1} \\ &\quad - 2\mu \int_0^1 v(x) [\phi'(u^{*'}(x)^2) u^{*'}(x)]' dx. \end{aligned}$$

Wenn $v \rightarrow 1$ am Rand und 0 sonst, oder $v(x) \rightarrow \delta(x - \hat{x})$, $\hat{x} \in (0, 1)$, $D_v J(u^*) = 0 \Rightarrow$

$$\begin{cases} -[\phi'(u^{*'}(x)^2) u^{*'}(x)]' + u^* = \tilde{u}, & 0 < x < 1 \\ u^{*'} = 0, & x = 0, 1 \end{cases}$$

Charakterisierung von u^* .

Lösungsmethoden.

Lagged Diffusivity oder Fixpunkt Iteration.

$$\begin{cases} -[\phi'(u_l'^2) u_{l+1}']' + u_{l+1} = \tilde{u}, & 0 < x < 1 \\ u_{l+1}' = 0, & x = 0, 1 \end{cases}$$

Newtons Verfahren.

Hintergrund: löse $F(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ oder $\mathbf{h} \cdot F(\mathbf{x}) = 0, \forall \mathbf{h} \in \mathbf{R}^n$.

Newtons Iteration: $\nabla F(\mathbf{x}_k) [\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k] = -F(\mathbf{x}_k)$

oder $\mathbf{h} \cdot \nabla F(\mathbf{x}_k) d\mathbf{x}_k = -\mathbf{h} \cdot F(\mathbf{x}_k), \forall \mathbf{h} \in \mathbf{R}^n$.

Gegenstück im Funktionenraum:

$$\partial J(u)[v] = 0, \quad \forall v \in H$$

$$\partial^2 J(u_k)[v, du_k] = -\partial J(u_k)[v], \quad \forall v \in H$$

Aufgabe: Zeige $J(u)$ zweimal differenzierbar und daher gilt $\partial^2 J(u)[v, w] = D_w D_v J(u)$, $\forall v, w \in H^1[0, 1]$.

$$\begin{aligned} D_w D_v J(u) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{D_v J(u + \varepsilon w) - D_v J(u)}{\varepsilon} = \dots \\ &= \int_0^1 \{ [2vw] + \phi'(u'^2)[2v'w'] + \phi''(u'^2)[2u'v'] [2u'w'] \} dx \end{aligned}$$

Newtons Verfahren $\partial^2 J(u_k)[v, du_k] = -\partial J(u_k)[v]$ wird:

$$\begin{aligned} \int_0^1 \{ [2vdu_k] + \phi'(u_k'^2)[2v'du_k'] + \phi''(u_k'^2)[2u_k'v'] [2u_k'du_k'] \} dx \\ = - \int_0^1 \{ 2(u_k - \tilde{u})v + 2\phi'(u_k'^2)u_k'v' \} dx \end{aligned}$$

Aufgabe: Wenn u_k und u_{k+1} genügend glatt sind, verwende partielle Integration, wähle v strategisch, und zeige

$$\begin{cases} -[2\phi''(u_k'^2)u_k'^2u_{k+1}']' + [2\phi''(u_k'^2)u_k'^3]' \\ -[\phi'(u_k'^2)u_{k+1}']' + u_{k+1} = \tilde{u}, & 0 < x < 1 \\ u_{k+1}' = 0, & x = 0, 1 \end{cases}$$

Fixpunkt Iteration ohne erste Zeile.

Mögliche numerischen Diskretisierungen wie vorher.

Wenn $s \mapsto \phi(s^2)$ nicht konvex, stationäre Lösungen nicht notwendigerweise minimierend oder eindeutig.

Minimierung unter linearen Einschränkungen.

Beispiel. Finde den kleinste Norm Punkt in einer Ebene.

Formulierung: mache L stationär

$$L(\mathbf{x}, \lambda) = J(\mathbf{x}) + \langle \lambda, E(\mathbf{x}) \rangle = \|\mathbf{x}\|^2 + \lambda(\mathbf{a} \cdot \mathbf{x} - b)$$

Notwendige Optimalitätsbedingung:

$$\left. \begin{array}{l} \nabla_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}, \lambda) = 2\mathbf{x} + \lambda\mathbf{a} = 0 \\ \nabla_{\lambda} L(\mathbf{x}, \lambda) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{x} - b = 0 \end{array} \right\} \begin{array}{l} \lambda = -2b/\|\mathbf{a}\|^2 \\ \mathbf{x}^* = b\mathbf{a}/\|\mathbf{a}\|^2 \end{array}$$

Hinreichende Optimalitätsbedingung:

$$\partial^2 J(\mathbf{x})[\mathbf{y}]^2 \geq \alpha \|\mathbf{y}\|^2, \quad \forall \mathbf{y} \text{ s.d. } \mathbf{a} \cdot \mathbf{y} = b$$

$$\partial^2 J(\mathbf{x})[\mathbf{y}]^2 = 2\|\mathbf{y}\|^2 \Rightarrow \alpha = 2$$

Basis der Bedingungen und Lösungsmethoden.

Seien $J \in C^2(H, \mathbf{R})$, $A \in \mathcal{L}(H, \Lambda)$ und

$$\min_{u \in H} J(u) \text{ s.d. } Au = r$$

Nimm an, daß $Au = r$ keine eindeutige Lösung hat: $\mathcal{N}(A) \neq \{0\}$.

Nimm an, daß $A \in \mathcal{L}(H, \Lambda)$ surjektiv ist: $\mathcal{N}(A)^\perp = \mathcal{R}(A^*)$.

$$\langle \lambda, Av \rangle_\Lambda = \langle A^* \lambda, v \rangle_H, \quad \forall \lambda \in \Lambda, \forall v \in H.$$

Störungen p , $u_2 = u_1 + p$, in $\{u : Au = r\}$ erfüllen $Ap = 0$.

Nimm an: $J(u^*) = \min_{u \in H} J(u)$ s.d. $Au = r$. Taylorsatz: $p \in \mathcal{N}(A)$,

$$J(u^* + p) = J(u^*) + \partial J(u^*)[p] + \frac{1}{2} \partial^2 J(u^*)[p]^2 + \sigma \|p\|_H^2$$

wobei $\sigma \rightarrow 0$ für $\|p\|_H \rightarrow 0$.

Wie vorher, sind die folgenden Bedingungen notwendig:

$$\begin{array}{l} \partial J(u^*)[p] = 0, \quad \forall p \in \mathcal{N}(A) \\ \partial^2 J(u^*)[p]^2 \geq 0, \quad \forall p \in \mathcal{N}(A) \end{array}$$

und die folgende hinreichend:

$$\exists \alpha > 0 \text{ s.d. } \partial^2 J(u^*)[p]^2 \geq \alpha \|p\|_H^2, \quad \forall p \in \mathcal{N}(A)$$

Die Eigenschaft $\partial J(u^*) \in \mathcal{L}(H, \mathbf{R})$ gibt die Rieszsche Darstellung: $\exists g \in H$ (“ $g = \nabla J$ ”) s.d.

$$\partial J(u^*)[v] = \langle g, v \rangle_H, \quad \forall v \in H$$

Also ist “der Gradient” der Einschränkungsmenge orthogonal:

$$0 = \partial J(u^*)[p] = \langle g, p \rangle_H, \quad \forall p \in \mathcal{N}(A)$$

und $g \in \mathcal{N}(A)^\perp = \mathcal{R}(A^*)$.

Lagrangescher Multiplikator Satz: $\exists \lambda^* \in \Lambda$ s.d. $g = -A^* \lambda^*$.

$$\partial J(u^*)[v] = \langle g, v \rangle_H = -\langle A^* \lambda^*, v \rangle_H = -\langle \lambda^*, Av \rangle_\Lambda$$

Notwendige Optimalitätsbedingung: (u^*, λ^*) stationär für die Lagrangesche Funktion

$$L(u, \lambda) = J(u) + \langle \lambda, Au - r \rangle_\Lambda$$

oder

$$\begin{aligned} \forall v \in H, \quad 0 &= \partial_u L(u^*, \lambda^*)[v] = \partial J(u^*)[v] + \langle \lambda^*, Av \rangle_\Lambda \\ \forall \kappa \in \Lambda, \quad 0 &= \partial_\lambda L(u^*, \lambda^*)[\kappa] = \langle \kappa, Av - r \rangle_\Lambda \end{aligned}$$

Die Räume hier sind Hilberträume - mit einem Innenprodukt ausgestattet. Es gibt ein ähnliches Argument, wenn die nur Banachräume sind - ohne ein Innenprodukt. Dann gelten $g \in H^*$ und $A \in \mathcal{L}(H, \Lambda^*)$, wobei $X^* = \mathcal{L}(X, \mathbf{R})$ definiert wird.

Beispiel: Finde die Kurve u^* mit kleinster Länge zwischen zwei Punkten.

Eingeschränktes Problem:

$$\min_{u \in C^1[0,1]} J(u) \quad \text{s.d.} \quad u(0) = 0, \quad u(1) = 1.$$

wobei:

$$J(u) = \int_0^1 \sqrt{1 + [u'(x)]^2} dx, \quad Au = \begin{bmatrix} u(0) \\ u(1) \end{bmatrix}, \quad r = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$A \in \mathcal{L}(C^1[0, 1], \mathbf{R}^2)$$

$$\|Au\|_{\mathbf{R}^2} \leq 2 \max_{x=0,1} |u(x)| \leq 2\|u\|_{C^1}$$

ist surjektiv:

$$\forall r \in \mathbf{R}^2, \quad \exists u \in C^1[0, 1] \quad \text{s.d.} \quad Au = r.$$

Notwendige Optimalitätsbedingung:

$$\begin{aligned} L(u, \lambda) &= J(u) + \langle \lambda, Au - r \rangle_{\mathbf{R}^2} \\ &= \int_0^1 \sqrt{1 + [u'(x)]^2} dx + \lambda_1 u(0) + \lambda_2 (u(1) - 1) \end{aligned}$$

stationär, oder

$$\begin{aligned} \forall v \in C^1[0, 1] \\ 0 = \partial_u L(u^*, \lambda^*)[v] &= \int_0^1 \frac{u^{*\prime}(x)v'(x)}{\sqrt{1 + [u^{*\prime}(x)]^2}} dx + \lambda_1^* v(0) + \lambda_2^* v(1) \end{aligned}$$

$$\forall \kappa \in \mathbf{R}^2$$

$$0 = \partial_\lambda L(u^*, \lambda^*)[\kappa] = \begin{bmatrix} \kappa_1 u^*(0) \\ \kappa_2 (u^*(1) - 1) \end{bmatrix}$$

Wenn u^* genügend glatt ist, gilt

$$\begin{aligned} \partial_u L(u^*, \lambda^*)[v] &= \frac{u^{*\prime}(x)}{\sqrt{1 + [u^{*\prime}(x)]^2}} v(x) \Big|_{x=0}^{x=1} + \lambda_1^* v(0) + \lambda_2^* v(1) \\ &\quad - \int_0^1 v(x) \left(\frac{u^{*\prime}(x)}{\sqrt{1 + [u^{*\prime}(x)]^2}} \right)' dx \end{aligned}$$

Wenn $v(x) \rightarrow \delta(x - \hat{x})$, $\hat{x} \in (0, 1)$, $\partial_u L(u^*, \lambda^*) = 0 \Rightarrow$

$$\left(\frac{u^{*'}(x)}{\sqrt{1 + [u^{*'}(x)]^2}} \right)' = 0, \quad x \in (0, 1).$$

Die allgemeine Lösung:

$$\left(\frac{u^{*'}(x)}{\sqrt{1 + [u^{*'}(x)]^2}} \right) = k_1 \Rightarrow u^{*'}(x) = k_2 \Rightarrow u^*(x) = k_2 x + k_3$$

Die Nebenbedingungen $\Rightarrow u^*(x) = x$ und

$$\lambda_1 = \frac{u^{*'}(0)}{\sqrt{1 + [u^{*'}(0)]^2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad \lambda_2 = -\frac{u^{*'}(1)}{\sqrt{1 + [u^{*'}(1)]^2}} = -\frac{1}{\sqrt{2}}.$$

$\lambda \neq \mathbf{0} \Rightarrow$ Einschränkungen *aktiv*.

Aufgabe: Etabliere den Rahmen und löse:

$$\min_{u \in H} J(u) = \int_0^1 \sqrt{1 + [u'(x)]^2} dx \quad \text{s.d.} \quad u(x_i) = u_i, \quad i = 1, n.$$

Hinweis: $H = H^1[0, 1]$ oder $H = C^0[0, 1] \cap_{i=1}^{n-1} C^0(x_i, x_{i+1})$.

Beispiel: Sei $\tilde{u} \in L^2[0, 1]$ verrauscht und finde $u \in H^1[0, 1]$ eine entrauschte Abschätzung mit $u(x_0) = u_0$, $x_0 \in (0, 1)$.

Formulierung:

$$\min_{u \in H^1} J(u) \quad \text{s.d.} \quad u(x_0) = u_0$$

wobei

$$J(u) = \int_0^1 [u(x) - \tilde{u}(x)]^2 dx + \mu \int_0^1 [u'(x)]^2 dx$$

$$Au = u(x_0), \quad r = u_0$$

$A \in \mathcal{L}(H^1[0, 1], \mathbf{R})$

$$|Au| = |u(x_0)| \leq \|u\|_{C^0} \leq \epsilon \|u\|_{H^1} \quad (\epsilon \text{ von Einbettung})$$

ist surjektiv:

$$\forall r \in \mathbf{R}, \quad \exists u \in H^1[0, 1] \quad \text{s.d.} \quad Au = r.$$

Notwendige Optimalitätsbedingung:

$$\begin{aligned} L(u, \lambda) &= J(u) + \langle \lambda, Au - r \rangle_{\mathbf{R}} \\ &= \int_0^1 [u(x) - \tilde{u}(x)]^2 dx + \mu \int_0^1 [u'(x)]^2 dx + \lambda [u(x_0) - u_0] \end{aligned}$$

stationär, oder

$$\begin{aligned} \forall v \in H^1[0, 1] \\ 0 = \partial_u L(u^*, \lambda^*)[v] &= 2 \int_0^1 \{ [u^*(x) - \tilde{u}(x)]v(x) + \mu u^{*\prime}(x)v'(x) \} dx \\ &\quad + \lambda^* v(x_0) \end{aligned}$$

$$\forall \kappa \in \mathbf{R}$$

$$0 = \partial_\lambda L(u^*, \lambda^*)[\kappa] = \kappa [u^*(x_0) - u_0]$$

Wenn u^* genügend glatt ist, gilt

$$\begin{aligned} \partial_u L(u^*, \lambda^*)[v] &= 2 \int_0^1 [u^*(x) - \tilde{u}(x)]v(x) dx + \lambda^* v(x_0) \\ &\quad + 2\mu u^{*\prime}(x)v(x) \Big|_{x=0}^{x=x_0} + 2\mu u^{*\prime}(x)v(x) \Big|_{x=x_0}^{x=1} \\ &\quad - 2\mu \int_0^{x_0} v(x)u^{*\prime\prime}(x) dx - 2\mu \int_{x_0}^1 v(x)u^{*\prime\prime}(x) dx \end{aligned}$$

Wenn $v \rightarrow 1$, $x \in \{0, x_0, 1\}$, und sonst 0, oder $v(x) \rightarrow \delta(x - \hat{x})$, $\hat{x} \in (0, x_0) \cup (x_0, 1)$, $\partial_u L(u^*, \lambda^*) = 0 = \partial_\lambda L(u^*, \lambda^*) \Rightarrow$

$$\begin{cases} -\mu u^{*\prime\prime} + u = \tilde{u}, & x \in (0, x_0) \cup (x_0, 1) \\ u^{*\prime} = 0, & x = 0, 1 \\ -\mu [u^{*\prime}] = \frac{1}{2}\lambda, & x = x_0 \\ u^* = u_0, & x = x_0 \end{cases}$$

Nimm $\tilde{u} = 0$, $\mu = 1$.

$$u'' = u \Rightarrow u(x) = A_i \cosh(x) + B_i \sinh(x),$$

$$i = 1 \text{ in } [0, x_0], \quad i = 2 \text{ in } [x_0, 1].$$

Die Nebenbedingungen \Rightarrow

$$u^*(x) = \begin{cases} u_0 \frac{\cosh(x)}{\cosh(x_0)}, & x \in [0, x_0] \\ u_0 \frac{\cosh(x) [1 - \tanh(1) \tanh(x)]}{\cosh(x_0) [1 - \tanh(1) \tanh(x_0)]}, & x \in [x_0, 1] \end{cases}$$

und

$$\lambda = \frac{2u_0 \tanh(1)}{\cosh(x_0)^2 [1 - \tanh(1) \tanh(x_0)]}$$

$\lambda \neq 0 \Rightarrow$ Einschränkung aktiv.

Minimierung unter nicht linearen Einschränkungen.

Seien $J \in C^2(H, \mathbf{R})$, $E \in C^2(H, \Lambda)$ und

$$\min_{u \in H} J(u) \quad \text{s.d.} \quad E(u) = 0$$

Nimm an: $J(u^*) = \min_{u \in H} J(u)$ s.d. $E(u^*) = 0$.

Bahn $u(t)$, $u(0) = u^*$, $E(u(t)) = 0 \Rightarrow$

$$0 = D_t E(u(t)) = \partial E(u(t))[D_t u(t)]$$

Störungen $p = D_t u(0)$ im Tangentraum erfüllen

$$0 = \partial E(u^*)[p]$$

Nimm an: $\mathcal{N}(\partial E(u^*)) \neq \{0\}$.

Nimm an: $\partial E(u^*) \in \mathcal{L}(H, \Lambda)$ surjektiv, so

$$\mathcal{N}(\partial E(u^*))^\perp = \mathcal{R}(\partial E(u^*)^*).$$

Tayloratz: $p \in \mathcal{N}(\partial E(u^*))$,

$$J(u^* + p) = J(u^*) + \partial J(u^*)[p] + \frac{1}{2} \partial^2 J(u^*)[p]^2 + \sigma \|p\|_H^2$$

wobei $\sigma \rightarrow 0$ für $\|p\|_H \rightarrow 0$.

Wie vorher, sind die folgenden Bedingungen notwendig:

$$\begin{aligned} \partial J(u^*)[p] &= 0, & \forall p \in \mathcal{N}(\partial E(u^*)) \\ \partial^2 J(u^*)[p]^2 &\geq 0, & \forall p \in \mathcal{N}(\partial E(u^*)) \end{aligned}$$

und die folgende hinreichend:

$$\exists \alpha > 0 \text{ s.d. } \partial^2 J(u^*)[p]^2 \geq \alpha \|p\|_H^2, \quad \forall p \in \mathcal{N}(\partial E(u^*)).$$

Notwendige Optimalitätsbedingung: wie vorher ist (u^*, λ^*) stationär für die Lagrangesche Funktion

$$L(u, \lambda) = J(u) + \langle \lambda, E(u) \rangle_\Lambda$$

oder

$$\begin{aligned} \forall v \in H, \quad 0 &= \partial_u L(u^*, \lambda^*)[v] = \partial J(u^*)[v] + \langle \lambda^*, \partial E(u^*)[v] \rangle_\Lambda \\ \forall \kappa \in \Lambda, \quad 0 &= \partial_\lambda L(u^*, \lambda^*)[\kappa] = \langle \kappa, E(u^*) \rangle_\Lambda \end{aligned}$$

Newtons Verfahren.

$$\begin{aligned} \partial_u \partial_u L(u, \lambda)[v, du] + \partial_u \partial_\lambda L(u, \lambda)[v, d\lambda] &= -\partial_u L(u, \lambda)[v] \\ \partial_\lambda \partial_u L(u, \lambda)[\kappa, du] + \partial_\lambda \partial_\lambda L(u, \lambda)[\kappa, d\lambda] &= -\partial_\lambda L(u, \lambda)[\kappa] \end{aligned}$$

oder

$$\begin{aligned} \partial^2 J(u)[v, du] + \langle \lambda, \partial^2 E(u)[v, du] \rangle_\Lambda &= -\partial J(u)[v] \\ \langle \kappa, \partial E(u)[du] \rangle_\Lambda &= -\langle \lambda, \partial E(u)[v] \rangle_\Lambda \\ &= -\langle \kappa, E(u) \rangle_\Lambda \end{aligned}$$

oder

$$\begin{bmatrix} W & Z^* \\ Z & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} du \\ d\lambda \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} R \\ S \end{bmatrix}$$

Gaußsche Elimination,

$$\begin{aligned} (ZW^{-1}Z^*)d\lambda &= ZW^{-1}R - S \\ Wdu &= R - Z^*d\lambda \end{aligned}$$

Notwendig: $W[p]^2 = \partial_u^2 L(u^*, \lambda^*)[p]^2 = D_t^2 J(u(0)) \geq 0$,
 $\forall p \in \mathcal{N}(\partial E(u^*))$.

Augmentierte Lagrangesche Funktion.

$$L_A(u, \lambda) = J(u) + \langle \lambda, E(u) \rangle_\Lambda + \rho \langle E(u), E(u) \rangle_\Lambda$$

Wenn (u^*, λ^*) stationär für $L(u, \lambda)$ ist, dann auch für $L_A(u, \lambda)$,

$$\begin{aligned} \partial_u L_A(u^*, \lambda^*)[v] &= \underbrace{\partial J(u^*)[v] + \langle \lambda^*, \partial E(u^*)[v] \rangle_\Lambda}_{=0} \\ &\quad + 2\rho \underbrace{\langle E(u^*), \partial E(u^*)[v] \rangle_\Lambda}_{=0} \\ \partial_\lambda L_A(u^*, \lambda^*)[k] &= \langle \kappa, \underbrace{E(u^*)}_{=0} \rangle_\Lambda \end{aligned}$$

aber $\partial_u^2 L_A(u^*, \lambda^*)[v, w]$ besser konditioniert mit $\rho > 0$:

$$\begin{aligned} \partial_u^2 L_A(u^*, \lambda^*)[v, w] &= \partial_u^2 L(u^*, \lambda^*)[v, w] \\ &\quad + 2\rho \langle \partial E(u^*)[v], \partial E(u^*)[w] \rangle_\Lambda \\ &\quad + 2\rho \underbrace{\langle E(u^*), \partial^2 E(u^*)[v, w] \rangle_\Lambda}_{=0} \\ &= \partial_u^2 L(u^*, \lambda^*)[v, w] \\ &\quad + 2\rho \langle \partial E(u^*)[v], \partial E(u^*)[w] \rangle_\Lambda \end{aligned}$$

oder

$$\partial_u^2 L(u^*, \lambda^*)[v]^2 = W[v]^2 + 2\rho \|\partial E(u^*)[v]\|_\Lambda^2 \geq \beta \|v\|_H^2.$$

Wende Newtons Verfahren für L_A an,

$$\begin{bmatrix} W + \rho A & Z^* \\ Z & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} du \\ d\lambda \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} R \\ S \end{bmatrix}$$

oder implementiere Augmentierte Lagrangesche SQP Iteration:

K. Ito, K. Kunisch, *Augmented Lagrangian SQP Methods in Hilbert Spaces and Application to Control in the Coefficient Problems*, SIAM J. on Optimization, Vol. 6, No. 1, pp. 96-125, February 1996.