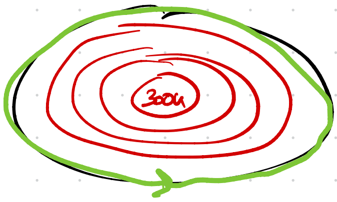
D: Püü
A: Oberfl. integrale, Satz von Gauß, Flächen
N: Trust-Region, Constrained Min, KKT

Globalübung 13
Mathe 3 – WS 24/25

22.01.2025
Lambert Theisen

A **Oberflächenintegral** (erster Ordnung) $f: F \to \mathbb{R}$ skalares Feld



$$\int_F f \, dS := \int_B f(\Phi(p,q)) \left\| \frac{\partial \Phi}{\partial p} \times \frac{\partial \Phi}{\partial q} \right\|_2 dp\,dq$$

↑ Parameterbereich $B = [0,\pi] \times [0, 2\pi]$

Beispiel: Integriere $f(x,y,z) = x^2 + y^2$ auf der Kugel-Oberfläche mit Radius R und MP in $(0,0,0)$.

→ **Kugelkoords**:
$$\phi(\theta,\varphi) = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R\sin\theta \cos\varphi \\ R\sin\theta \sin\varphi \\ R\cos\theta \end{pmatrix}$$
sieht kompliziert aus aber $\sin^2 + \cos^2$ rettet uns

$0 \leq \varphi \leq 2\pi$
$0 \leq \theta \leq \pi$

$$\Rightarrow f(\Phi(\theta,\varphi)) = R^2 \sin^2\theta \cos^2\varphi + R^2 \sin^2\theta \sin^2\varphi = R^2 \sin^2\theta$$

→ **Weiterhin**:
$$\frac{\partial \Phi}{\partial \theta} = \begin{bmatrix} R\cos\theta \cos\varphi \\ R\cos\theta \sin\varphi \\ -R\sin\theta \end{bmatrix}, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} = \begin{bmatrix} -R\sin\theta \sin\varphi \\ R\sin\theta \cos\varphi \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} \times \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} = \begin{bmatrix} R^2 \sin^2\theta \cos\varphi \\ R^2 \sin^2\theta \sin\varphi \\ R^2 \sin\theta\cos\theta\cos^2\varphi + R^2 \sin\theta\cos\theta \sin^2\varphi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R^2\sin^2\theta\cos\varphi \\ R^2 \sin^2\theta \sin\varphi \\ R^2 \sin\theta\cos\theta \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow \left\| \frac{\partial \Phi}{\partial p} \times \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} \right\|_2 = \left(R^4 \sin^4\theta \cos^2\varphi + R^4 \sin^4\theta \sin^2\varphi + R^4 \sin^2\theta\cos^2\theta \right)^{1/2}$$

$$= \left(R^4 \sin^4\theta + R^4 \sin^2\theta \cos^2\theta \right)^{1/2}$$

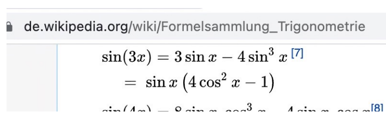
$$= \sqrt{R^4 \sin^2\theta} \overset{\sin\theta > 0}{=} R^2 \sin\theta$$

→ **Daher**:
$$\int_{\partial B_2(0,0,0)} f(\Phi(\theta,\varphi))\, dS = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} (R^2 \sin^2\theta) \cdot (R^2 \sin\theta)\, d\theta\, d\varphi$$

$$= R^4 \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \sin^3\theta \, d\theta\, d\varphi = 2\pi \cdot R^4 \int_0^{\pi} \sin^3\theta \, d\theta$$

$$= 2\pi R^4 \int_0^{\pi} \underbrace{\tfrac{1}{4}\left(3\sin\theta - \sin(3\theta)\right)}_{\text{Formelzettel}} d\theta = \frac{\pi R^4}{2} \left[-3\cos\theta + \frac{1}{3}\cos(3\theta) \right]_0^{\pi}$$

$$= \frac{\pi R^4}{2} \left[3 - \frac{1}{3} - \left(-3 + \frac{1}{3}\right) \right] = \frac{8\pi R^4}{3}$$


de.wikipedia.org/wiki/Formelsammlung_Trigonometrie

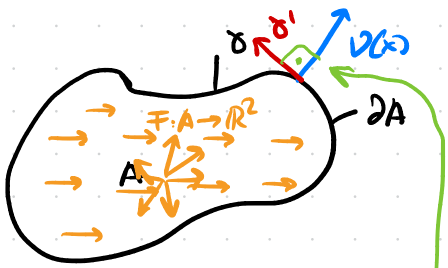
$\sin(3x) = 3\sin x - 4\sin^3 x$ [7]
$\quad = \sin x\,(4\cos^2 x - 1)$

Oberflächenintegral zweiter Ordnung

Sei $\vec{F}: \Omega \to \mathbb{R}^3$, $\int_F \vec{F}\, d\vec{A} := \int_B \langle \vec{F}(\Phi(p,q)), \Phi_p \times \Phi_q \rangle \, d(p,q)$

$\Rightarrow$ Wie bei den Kurvenintegralen...

A) Satz von Gauß in $\mathbb{R}^2$



- Framework:
  - Vektorfeld $F: A \to \mathbb{R}^2$ ("Strömung")
  - A stückweise glatt berandet
  - $\bar{A} = A \cup \partial A$ ($\overline{(0,1)} = [0,1]$)

- Äußere Normale in $x \in \partial A$ falls:
  - I): $\|\nu(x)\| = 1$
  - II): $\nu(x) \cdot \gamma'(t_0) \boxed{= 0}$ $\forall$ Randkurven mit $\gamma(t_0) = x$
  - III): $\exists\, c \in (0,\infty)$ sodass $x + \varepsilon \nu(x) \notin A$ $\forall \varepsilon \in (0,c)$
    "Zeigt nach außen"

- Satz von Gauß 2D: Sei $A \subset \mathbb{R}^2$ stückweise glatt berandet und $F: \bar{A} \to \mathbb{R}^2$ stetig diff'bares Vektorfeld mit ÄN $\nu(x)$ auf ∂A. Dann:

$$\int_{\partial A} F \cdot \nu \, ds = \int_A \underbrace{\left(\frac{\partial F_1}{\partial x_1} + \frac{\partial F_2}{\partial x_2} \right)}_{\operatorname{div}(F)} dx$$

("Fluss durch ∂A $\hat{=}$ divergenz in A")

$\operatorname{div}(F)$ $\hat{=}$ Maß für Quellen/Senken

Beispiel:

Aufgabe 114. (Gauss's theorem)
Verify Gauss's theorem for the region bounded by

$$P = \{(x,y) \in \mathbb{R}^2 : 4 = x^2 + y^2\}$$

for the vector field

$$F(x,y) = (x,y)^T.$$

ZZ: $\int_{\partial P} F \cdot \nu \, ds \overset{!}{=} \int_A \left(\frac{\partial F_1}{\partial x_1} + \frac{\partial F_2}{\partial x_2} \right) dx$

I) LHS: Parametrisiere $\partial P = \gamma([0,2\pi])$

mit $\gamma(t) = \begin{bmatrix} 2\cos(t) \\ 2\sin(t) \end{bmatrix}$ $\Rightarrow T(t) = \gamma'(t) = 2 \begin{bmatrix} -\sin(t) \\ \cos(t) \end{bmatrix}$

$\Rightarrow N(t) = T'(t) = 2 \begin{bmatrix} -\cos(t) \\ -\sin(t) \end{bmatrix}$

$N(t)$ zeigt nach innen. Bzg III) der äußeren Normalen bringt daher:

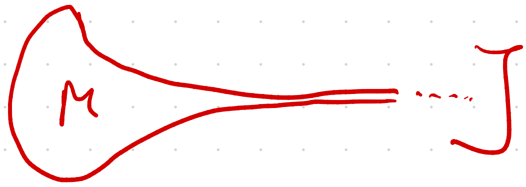
$\nu(t) = 2 \begin{bmatrix} \cos(t) \\ \sin(t) \end{bmatrix} = -N(t)$

Daher $\int_{\partial P} F \cdot \nu \, ds = \int_0^{2\pi} \left\langle \begin{pmatrix} 2\cos(t) \\ 2\sin(t) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2\cos(t) \\ 2\sin(t) \end{pmatrix} \right\rangle dt = 4 \int_0^{2\pi} 1 \, dt = 8\pi$

II) RHS: $\int_P \left(\frac{\partial F_1}{\partial x_1} + \frac{\partial F_2}{\partial x_2}\right) dx = \int_P (1+1)\, dx = \int_0^2 \int_0^{2\pi} 2 \, d\varphi \, dr = \int_0^2 4\pi = 8\pi$

$F = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$

$\Rightarrow$ LHS = RHS, wie nach Gauß. ✓



abgeschlossen + beschränkt → + kompakt

Satz von Gauß in $\mathbb{R}^n$: Sei $M \subset \mathbb{R}^n$ offene Menge mit stückweise glattem Rand ∂M. Für $F: \bar{M} \to \mathbb{R}^n$ stetig diff'bar gilt:

$\nabla \cdot F = \mathrm{div}(F)$ →

$$\boxed{\int_M \nabla \cdot (F)\, dx = \int_{\partial M} F \cdot \nu \, dS}$$

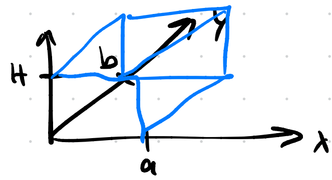
mit $\|\nu\| = 1$ äußere Normale.

Beispiel: Berechne den Fluss von $F: \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3, \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} x \cdot z \\ y \cdot z \\ x^2 + y^2 \end{pmatrix}$

©TUGa7

durch die Oberfläche des Quaders Q, der durch folgende Flächen begrenzt ist:

$x = 0 \quad y = 0 \quad z = 0$
$x = a \quad y = b \quad z = h$



→ **Problem:** $\int_{\partial Q} F \cdot \nu \, dS$ wären 6 Integrale...

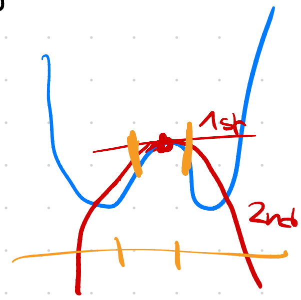
→ **Lösung:** Nutze Gauß mit $\mathrm{div}\, F = \frac{\partial F_1}{\partial x} + \frac{\partial F_2}{\partial y} + \frac{\partial F_3}{\partial z} = z + z + 0 = 2z$

Mit Gauß: $\int_{\partial Q} F \cdot \nu \, dS = \int_Q \mathrm{div}(F)\, dx = \int_0^a \int_0^b \int_0^H 2z \, dz\, dy\, dx$

$= \int_0^a \int_0^b H^2 \, dy\, dx = a \cdot b \cdot H^2$ easy ✓

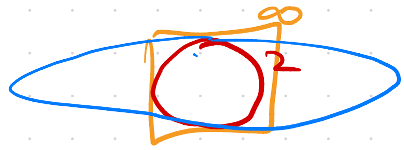
Trust-Region Methods:

- **Problem**: Stationärer Punkt kann auch Sattelpunkt sein
  $\leadsto$ Das wollen wir nicht! (siehe Bsp aus VL & vorheriger Übung)



- **Idea**: Minimiere "lokal" in einer Region D_k mit einer Approximation von f (zB. 2nd Order Taylor)
- **Folge**: So können wir auch Sattelpunkten "entkommen"

Algorithm:



- Given $x^{(0)}$
- Replace f by $\hat{f}$ (approximation), e.g.

$$\hat{f}(x) = f(x^{(k)}) + (x-x^{(k)})^T \nabla f(x^{(k)}) + \frac{1}{2}(x-x^{(k)})^T \nabla^2 f(x^{(k)})(x-x^{(k)})$$

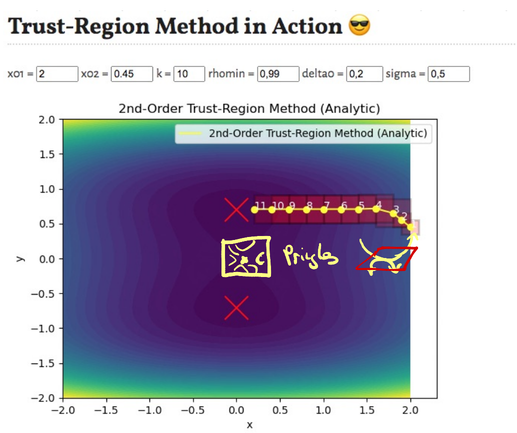
- Für eine Trust Region $D_k := \{ x \in \mathbb{R}^n : \|x-x^{(k)}\| \leq \delta \}$ mit $\delta > 0$, löse:

$$\hat{x} = \arg\min_{x \in D_k} \hat{f}(x)$$

- Teste Verbesserung: $\rho = \dfrac{\text{actual improve}}{\text{predicted improve}} = \dfrac{f(x^{(k)}) - f(\hat{x})}{\underbrace{f(x^{(k)})}_{=\hat{f}(x^{(k)})} - \hat{f}(\hat{x})}$

- Wenn $\rho \approx 1$, setze $x^{(k+1)} = \hat{x}$
- Falls nicht: Verkleinere trust region: $\delta \longleftarrow \beta \cdot \delta \quad (\beta \in (0,1))$

Demo: Trust-Region Methods



Constraint Optimization

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} f(x) \quad \text{subject to} \quad \begin{cases} g_i(x) \geq 0 \\ h_j(x) = 0 \end{cases}$$

$$\boxed{\begin{aligned} f &: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R} \\ g &: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m \\ h &: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^q \end{aligned}}$$

$$\min_{(x,y)\in\mathbb{R}^2} f \quad \text{mit} \quad 2x \leq y \mathrel{\hat{=}} \tilde{g}(x)$$

$$\Leftrightarrow 0 \leq \underbrace{y-2x}_{g(x)}$$

LP (Linear Progr.): f, g, h linear

NLP (Nonlinear Prog.): f oder g oder h nicht linear

Feasability Region $\mathcal{X}$ (\chi): $\min_{x\in\mathcal{X}} f(x)$ mit $\mathcal{X} = \{x \in \mathbb{R}^n \mid g_i(x) \geq 0, h_j(x) = 0\}$

Minimizer: $x^* = \operatorname{argmin}_{x\in\mathcal{X}} f(x)$

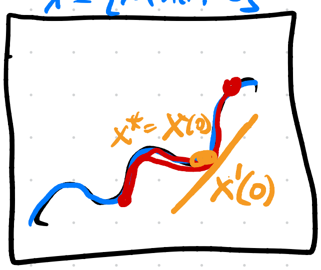
KKT-Bedingungen: Sind notwendig für kritischen Punkt (Min, Max, Sattel)
(wenn bestimmte Regularität → LICQ)

→ $\boxed{\text{Aber wo kommen die her?}}$

Equality Constraints: Betrachte $\begin{cases} \min f(x) \\ \text{s.t. } h(x) = 0 \end{cases}$

$\lambda : (-1,1) \to \mathcal{X}$

$\mathcal{X} = \{x \mid h(x) = 0\}$



→ Wir wollen natürlich ein x^* mit: $\boxed{h(x^*) = 0}$ $\boxed{A}$

→ Weiterhin: $\nabla h(x^*)$ muss parallel zu $\nabla f(x^*)$.

Warum?: Sei $\lambda : (-1,1) \to \mathcal{X} = \{x \mid h(x) = 0\}$ Param. mit
$\lambda(0) = x^*$

Nun gehe entlang $F(t) := f(\lambda(t))$. Wir haben $f(\lambda(0)) = f(x^*) = F(0)$ ist kritischer Pkt.

kritischer Punkt heißt : $F'(0)=0 \Rightarrow \frac{d}{dt} f(x(t))\Big|_{t=0} = 0$

Kettenregel

$\Rightarrow \nabla f(\underbrace{x(0)}_{x^*})^T \cdot x'(0) = 0 \iff \boxed{\nabla f(x^*) \perp x'(0)}$

Weiterhin ist ja per Definition : $h(x(t)) = 0 \ \forall t \Rightarrow \frac{d}{dt} h(x(t))\Big|_{t=0} = 0 \Rightarrow \boxed{\nabla h(x^*) \perp x'(0)}$

Daher im kritischen Punkt x^* : $\boxed{\nabla f(x^*) \parallel \nabla h(x^*) \iff \nabla f(x^*) = \mu^* \nabla h(x^*)}$ $\boxed{B}$

$\mu^* \in \mathbb{R}$

Jetzt klevere Idee

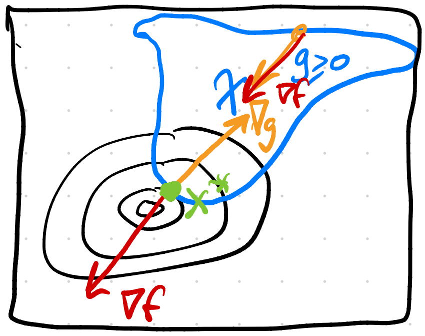
Definiere Lagrange function : $\mathcal{L}(x,\mu) := f(x) - \mu h(x)$ why?!

und suche $\overbrace{\nabla \mathcal{L}(x^*,\mu^*)}^{\text{ein } \mu^* \in \mathbb{R}} = \begin{bmatrix} \nabla_x \mathcal{L}(x^*,\mu^*) \\ \nabla_\mu \mathcal{L}(x^*,\mu^*) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \nabla f(x^*) - \mu^* \nabla h(x^*) \\ -h(x^*) \end{bmatrix} \stackrel{!}{=} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$ $\boxed{B}$ $\boxed{A}$

→ Das kombiniert $\boxed{A}$ & $\boxed{B}$!

Inequality Constraint

$\boxed{A}$ $\boxed{g(x^*) \geq 0}$ (Def)



wie in Grün

I) Inactive ($g(x^*) > 0$) $\Rightarrow$ $\boxed{\nabla f(x^*) = 0}$ $\boxed{B1}$

II) Active ($g(x^*) = 0$) $\Rightarrow$ $\boxed{\nabla f(x^*) = \lambda^* \nabla g(x^*)}$ $\boxed{B2}$ (Wie oben bei Eq.-Const h)

↳ siehe oben

$\boxed{\lambda^* \geq 0}$ $\boxed{C}$

→ $\lambda^* \geq 0$ muss sein sodass $\nabla f(x^*)$ und $\nabla g(x^*)$ in entgegengesetzte Richtg. für Minimum.

→ Kombination von $\boxed{A}$, $\boxed{B1}$, $\boxed{B2}$, $\boxed{C}$:

nur aktive ...

$$\begin{cases} \nabla f(x^*) - \lambda^* \nabla g_i(x^*) = 0 & \\ g_i(x^*) \geq 0 & \boxed{A} \\ \lambda_i^* \geq 0 & \boxed{C} \\ g_i(x^*)\lambda_i^* = 0 & \text{Komplementär} \end{cases}$$

$\boxed{B1} + \boxed{B2}$

wenn $g(x^*) = 0$ B1

wenn $g(x^*) > 0$ B2

weil $\lambda^* = 0$ dann ✓

Karush-Kuhn-Tucker Bedingungen (kombiniert alle Bdg. für mehrere Constraints)
KKT

$$\begin{cases} \nabla \mathcal{L}(x,\lambda,\mu) = \nabla f(x) - \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \nabla g_i(x) - \sum_{j=1}^{q} \mu_j \nabla h_j(x) = 0 \\ h_j(x) = 0 \\ g_i(x) \geq 0 \\ \lambda_i \geq 0 \\ g_i(x)\lambda_i = 0 \end{cases}$$

mit $x \in \mathbb{R}^n$, $\lambda \in \mathbb{R}^m$, $\mu \in \mathbb{R}^q$. $\underbrace{\text{KKT-Point}}_{\text{kritische Punkte}} \hat{=} (x^*, \underbrace{\lambda^*, \mu^*}_{\text{Lagrange Multipliers}})$ wenn Bdg. erfüllt.

Nun: Berechnung der Kandidaten als KKT-Punkte?

Problem: Es gibt NLP für die das Minimum kein KKT Punkt ist.
(Nur wenn bestimmte Glattheits/Regularitäts eigenschaften erfüllt sind)

LICQ: ("Linear Independence Constraint Qualification")

Punkt $x \in \mathcal{X}$ hat LICQ falls: $\left(\{\nabla h_j(x)\}_{j=1}^{q}, \{\nabla g_i(x)\}_{i \in I_g(x)} \right)$ linear unabhängig

mit $I_g(x) = \{ i \in \{1,\dots,m\} \mid g_i(x) = 0 \}$ Menge aller aktiven Bedingungen
zB. $I_g(x) = \{1, 2, 5, 8\}$

$\Rightarrow$ Wenn LICQ in x^* gilt, dann sind KKT FONC für kritische Punkte x^*
(1st-order necessary condition) (wie $\nabla f = 0$
2nd $\nabla^2 f > 0$
$\Rightarrow$ min

In der ~~Praxis~~ HW:
I) Potentielle KKT Punkte finden
II) LICQ dort prüfen
III) Falls LICQ gilt $\Rightarrow$ Hessematrix (zB) untersuchen für Min/Max/Sat.

Demo: KKT & LICQ

Define Lagrangian

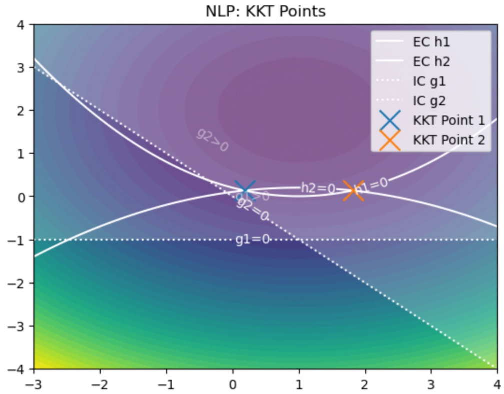
$$\mathcal{L}(x, \lambda, \mu) = f(x) - \sum_{i=1}^{m} \lambda_i g_i(x) - \sum_{j=1}^{q} \lambda_i h_i(x)$$

lagrangian (generic function with 1 method)

```
function lagrangian(x, f, g, h, λs, μs, Ig)
    # TODO: Include only active gs with Ig
    return (
        f(x)
        # - reduce(+, [g[i](x) * λs[i] for i=1:size(g)[1]], init=0)  # TODO: Include
        - reduce(+, [h[i](x) * μs[i] for i=1:size(h)[1]], init=0)
    )
end
```

$$-\mu\left(-5x_2 + (x_1 - 1)^2\right) + (x_1 - 1)^2 + (x_2 - 2)^2$$

```
lagrangian(x, f1, [], h, lambdas, mus, [])
```



Linear Independence Constraint Quality (LICQ)

Point $x \in \chi$ satisfies LICQ if:

$$\{\nabla h_j(x)\}_{j=1}^{q}, \{\nabla g_i(x)\}_{i \in I_g(x)}$$

are linearly independent. The set of active inequality constraints at point x is labelled with $I_g(x)$.

Index Set of Active Constraints:

Ig (generic function with 1 method)

```
function Ig(x,g)
    return [i for i=1:size(g)[1] if g[i](x)==0]
end
```

LICQ (generic function with 1 method)

```
function LICQ(ξ, g, Ig, h)
    set = hcat(
        # [diff(g[i](x), x) for i ∈ Ig(ξ,g)],
        [diff(h[i](x), x) for i ∈ 1:size(h)[1]]
    )
    return set
end
```