

求解线性椭圆型 PDE 约束优化问题的 PDAS 算法

(摘要)

作 者: 朱湛昕

专 业: 计算数学

指导教师: 宋海明 副教授

PDE 约束优化问题在科学和工程领域有着广泛的应用. 本文主要研究线性椭圆型 PDE 约束优化问题, 并给出求解该问题的 PDAS 算法. 首先我们根据 CPU 散热问题建立了相应的 PDE 约束优化模型, 并讨论了模型的解的存在唯一性和一阶最优性条件; 然后使用有限元方法对原始问题进行离散, 讨论了有限元离散的误差估计; 进一步针对离散问题, 使用原始对偶积极集算法 (PDAS) 进行数值求解, 并对 PDAS 算法进行了误差分析, 详细证明了整体求解算法的超线性收敛性; 最后给出了具体的数值实验结果, 验证了总体误差的收敛性结果. 通过与投影梯度法 (GPM) 和 Matlab 中的 quadprog 函数的对比, 表明了 PDAS 算法的计算速度要好于 GPM 算法和 Matlab 中的 quadprog 函数, 进一步说明了 PDAS 算法在解决 PDE 约束优化问题上的高效性.

关键词: PDE 约束优化; 有限元方法; 原始对偶积极集方法; CPU 散热问题.

**PDAS Algorithm for Solving Optimization Problems
Constrained by Linear Elliptic Partial Differential Equations
(Abstract)**

Author: Zhu Zhanxin

Major: Computational Mathematics

Advisor: Associate Professor Song Haiming

PDE-constrained optimization problems have widespread applications in science and engineering. This paper mainly studies linear elliptic PDE-constrained optimization problems and proposes a PDAS algorithm to solve them. Firstly, we establish the corresponding PDE-constrained optimization model based on the CPU cooling problem and discuss the existence, uniqueness and first-order optimality conditions of the model's solutions. Then, we discretize the original problem using the finite element method and discuss the error estimate of the finite element discretization. Further, for the discretized problem, we use the primal-dual active set algorithm (PDAS) for numerical solutions and analyze the error of the PDAS algorithm, demonstrating the superlinear convergence of the overall solution algorithm in detail. Finally, specific numerical experimental results are presented, verifying the convergence of the overall error. By comparing with the projection gradient method (GPM) and the quadprog function in Matlab, we show that the PDAS algorithm is faster than the GPM algorithm and the quadprog function in Matlab, further demonstrating the efficiency of the PDAS algorithm in solving PDE-constrained optimization problems.

Keywords: PDE-constrained optimization; Finite Element Method; Primal-Dual Active Set Strategy; CPU cooling problem.

目 录

第 1 章 绪论	1
1.1 研究背景及意义	1
1.2 国内外研究现状	2
1.2.1 PDE 约束优化问题	2
1.2.2 PDAS 算法	3
1.3 论文结构	3
第 2 章 建立数学模型	5
2.1 实际问题	5
2.2 建立数学模型	6
第 3 章 数学模型的最优性理论	8
3.1 约束方程的适定性	9
3.2 最优控制的存在唯一性	14
3.3 一阶最优性条件	17
第 4 章 数学模型的离散化	20
4.1 有限元离散及误差分析	20
4.2 有限维空间中的优化模型	25
4.2.1 离散约束方程	25
4.2.2 离散目标泛函	25
第 5 章 离散化模型的求解	28
5.1 PDAS 算法的流程	28
5.2 PDAS 算法的收敛性	29
5.3 总体误差分析	31
第 6 章 数值算例	34
6.1 Neumann 边界条件	34

6.2 Dirichlet 边界条件	38
第 7 章 总结与展望	41
参考文献	42
致谢	45

第 1 章 绪论

1.1 研究背景及意义

在科学研究中, 偏微分方程 (Partial Differential Equation, PDE) 具有十分重要的意义, 许多物理现象和物理过程都可以用 PDE 来描述, 所以 PDE 被广泛应用于机械制造、航空航天、传染病动力学、城市交通规划、化工生产以及金融投资等领域. 经过无数学者多年的研究, 已经有许多方法可以用于求 PDE 的显示解析解或数值解.

随着实际问题复杂性的不断增加, 人们不再只局限于研究 PDE 的求解方法, 进而开始关注能否控制 PDE 中某些变量 (控制变量) 的取值, 使得 PDE 的解 (状态变量) 达到某种理想状态, 这就是典型的 PDE 约束优化问题 (也称 PDE 约束最优控制问题).

PDE 约束优化问题有很多种类, 常见的分类方式有三种. 根据 PDE 约束类型的不同, 我们可以将问题分为椭圆型、抛物型和双曲型约束优化问题; 根据问题的线性性质可以将其分为线性问题和非线性问题; 而根据控制变量作用方式的不同, 可以将问题分为分布控制问题和边界控制问题两类——分布控制指控制变量作用于整个求解区域, 而边界控制指控制变量只作用于求解区域的边界.

通常来说, PDE 约束优化问题没有显式解, 所以我们只能求出问题的数值解. 随着问题规模的不断扩大, 如何设计出高效稳定的数值解法一直是研究这类模型应用和发展的关键问题. 进入 21 世纪, 晶体生长、血管外科和心脏医学等学科飞速发展, 对于这些领域的研究经常需要求解 PDE 约束优化的相关问题, 所以有越来越多的学者都开始投身于 PDE 约束优化问题数值解法的研究之中.

1.2 国内外研究现状

1.2.1 PDE 约束优化问题

PDE 约束优化问题具有悠久的发展历史, 关于问题理论方面的研究如问题的适定性、控制-状态算子的性质、对偶问题、一阶必要最优性条件 [4]、解的正则性等已经比较完善了 [28], 大部分 PDE 约束优化问题都不能求出显式解, 只能用数值解来近似代替, 所以高效的数值算法在 PDE 约束优化问题的研究中占据十分重要的地位. 基于 PDE 约束优化问题的性质与结构, 目前有两种主流的求解策略: 先优化后离散和先离散后优化 [9]. 容易证明当连续最优化问题最优性条件的离散形式与离散最优化问题的最优性条件等价时, 这两种策略也是等价的 [31]. 不过它们在系统结构方面存在一定的差距, 这也为了研究人员沿着不同方向设计算法提供了机会. 根据问题中是否考虑控制约束, 可将目前的数值算法分为两类: 解决无约束问题的数值算法主要有最速下降法、牛顿法、序列二次规划 (SQP) [13] 等; 解决带约束问题的数值算法主要有投影法 [23, 5]、原始对偶积极集方法 (Primal-Dual Active Set, PDAS) [15]、半光滑牛顿法 (Semi-Smooth Newton, SSN) [16] 等. 接下来我们按时间顺序介绍 PDE 约束优化问题求解方法的研究工作.

2003 年, Ito 和 Kunisch 导出了带状态约束的约束优化问题最优性系统, 用半光滑牛顿法进行求解 [19]. 2007 年, Casas 用有限元方法对半线性椭圆约束优化问题进行数值逼近, 得到了方法 L^2 误差的一阶收敛性 [7]. 2009 年, Lass 等人给出了求解椭圆约束优化问题的有限元多重网格格式的详细实现和分析 [21]. 2012 年, Apel 和 Flaig 基于 Crank-Nicolson 方法, 提出了抛物型约束优化问题的一系列离散化格式 [2]. 2013 年, Stoll 和 Wathen 提出了一种同时求解离散非定常 Stokes 约束优化问题的所有时间步长的方法 [27]. 2017 年, Li 等人针对抛物型约束优化问题的一阶必要最优性系统, 提出了一种时间上为二阶的有限差分格式, 能够在多重网格框架下有效地实现问题的快速求解 [22]. 2020 年, Yang 等人应用交替方向乘子法 (Alternating

Direction Method of Multipliers, ADMM) 来解决有限元离散后的约束优化问题, 并验证了方法的有效性 [31]. 2023 年, Lin 等人建立了求解具有 L^2 范数控制约束的椭圆约束优化问题的 hp 谱元方法的先验和后验误差估计.

1.2.2 PDAS 算法

原始对偶积极集 (Primal-Dual Active Set, PDAS) 方法是一个求解约束优化问题的高效数值算法. 2000 年, Ito 和 Kunisch 在研究 Hilbert 空间中的非光滑凸优化问题时, 第一次提出了基于正则最优性系统的积极集算法, 并用数值结果表明该算法可在有限步内收敛 [17], 之后他们将 PDAS 算法用于椭圆变分不等式约束优化问题的数值求解, 发现 PDAS 算法可以在有限步收敛到问题的精确解 [18]. 2002 年, Hintermüller, Ito 和 Kunisch 证明了 PDAS 算法和特定的半光滑牛顿法在解决约束优化问题时的等价性, 从而得到了 PDAS 算法新的收敛性结果 [15]. 经过之后几年的发展, 越来越多的问题都开始应用 PDAS 算法进行数值计算. 2015 年, Robinson 将 PDAS 算法应用于两种大规模约束优化问题, 在弱假设下得到了算法的超线性局部收敛性 [26]. 2016 年, Curtis 和 Han 将 PDAS 算法应用于一类大规模的凸二次优化问题, 并且对 PDAS 进行改进, 得到了非精确的 PDAS 算法 [8]. 2019 年, He 和 Yang 针对一类含有 T-单调算子的非线性问题使用了 PDAS 算法, 并证明了算法的收敛性 [14]. 2022 年, Qian 等人利用 PDAS 算法计算双资产美式择好期权的单边定价问题, 先用差分法和有限元方法对问题进行离散, 再使用 PDAS 算法求解离散问题的数值解, 最后通过数值实验验证了该算法的有效性 [24].

1.3 论文结构

首先, 本文针对中央处理器散热问题建立相应的 PDE 约束优化模型, 接着考虑模型的适定性以及解的唯一性, 然后采取先离散后优化的策略求解模型, 并进行误差分析, 最后针对两种不同情况下的散热问题进行数值模拟, 验证方法正确性和收敛性.

本文的结构安排如下:

第一章主要介绍 PDE 约束优化问题的研究背景和研究意义以及国内外研究现状.

第二章对一个具有实际背景的例子进行数学建模, 得到一个典型的线性椭圆 PDE 约束优化问题, 并介绍问题的相关要素.

第三章介绍本文研究的线性椭圆型 PDE 约束优化问题解的存在唯一性和一阶最优性条件.

第四章采用有限元方法对问题的 PDE 约束和目标泛函进行离散, 得到离散的问题, 并讨论有限元方法的收敛性结果和误差估计.

第五章给出求解离散问题的 PDAS 算法, 并介绍 PDAS 算法的收敛性结果, 最后讨论问题求解过程中的总体误差及误差的收敛阶.

第六章通过两种 PDE 约束优化问题的数值算例来验证算法的正确性和收敛性结果, 并与其他数值算法形成对比实验.

第 2 章 建立数学模型

在本章中, 我们将从一个实际问题出发, 建立线性椭圆 PDE 约束优化问题的数学模型. 在 2.1 中, 我们介绍了实际问题的相关背景; 在 2.2 中, 我们给出了问题的数学模型, 并对函数空间和相关参数做出了假设.

2.1 实际问题

本文主要讨论的是物理上一个常见的散热问题, 问题背景如下: 个人计算机在正常运行时中央处理器 (CPU) 的发热量很大, 需要在 CPU 上加装散热器, CPU 的顶盖是一个金属平面, 散热器的底部也是一块铜制的平面. 散热器安装时将散热器铜底和 CPU 顶盖紧密接触, 中间用导热硅脂填充, 计算机运行时 CPU 产生的热量传导到散热器上, 最后由散热器上金属鳍片将热量散发出去. CPU 在运行时有一个最佳工作温度, 而我们的目标就是通过调整散热器的温度, 使得在散热到达稳态时, CPU 表面的温度尽可能地接近 CPU 运行时的最佳工作温度, 同时也要使散热器在散热过程中消耗的能量相对较小.



图 1: 常见的 CPU 和散热器.

2.2 建立数学模型

本小节将 2.1 节的实际问题用数学语言来描述, 建立一个线性椭圆 PDE 约束优化问题的模型, 并介绍问题的相关要素.

因为 CPU 的厚度很小, 而且只有其表面与散热器相接触, 所以我们可以将问题的求解区域看成一个二维区域 Ω , 区域的边界用 Γ 表示. 散热器对整个 Ω 区域进行散热, 散热器的温度只与区域 Ω 上的点 x 有关, 记为 $u(x)$ ($x \in \Omega$). 由于实际散热器散热能力有限, 散热器温度的逐点最大值不超过常值 u_b , 最小值不低于常值 u_a . 同时将 CPU 的最佳工作温度记为 $y_\Omega(x)$, 考虑如何找到一个合适的散热器温度 $u^*(x)$, 使得 CPU 表面的温度分布 $y(x)$ ($x \in \Omega$) 尽可能接近理想的温度分布 $y_\Omega(x)$. 当散热达到稳态时, $y(x)$ 与 $u(x)$ 之间的关系可以用一个椭圆型 PDE 来描述 [32]. 所以这是一个典型的椭圆型 PDE 分布约束优化问题, 可以建立以下数学模型:

$$\min J(y, u) := \frac{1}{2} \int_{\Omega} |y(x) - y_\Omega(x)|^2 dx + \frac{\lambda}{2} \int_{\Omega} |u(x)|^2 dx, \quad (2.1)$$

满足状态约束方程

$$\begin{cases} -\Delta y + \beta y = \gamma u & \text{in } \Omega \\ \partial_\nu y = \alpha(y_a - y) & \text{on } \Gamma \end{cases} \quad (2.2)$$

和逐点控制约束

$$u_a \leq u(x) \leq u_b \quad \text{in } \Omega, \quad (2.3)$$

其中 λ 是比例因子 (也称正则化参数, 主要作用是使可能的最优解表现出正则性). $y_a(x)$ 是外界温度, $\alpha(x)$ ($x \in \Gamma$) 是 CPU 边界上的点与外界的热传导系数, 其值与 CPU 的材质等有关. $\beta(x)$ ($x \in \Omega$) 和 $\gamma(x)$ ($x \in \Omega$) 是相关系数函数, 其中 $\beta(x)$ 在实际问题中通常恒取零. $\nu(x)$ ($x \in \Gamma$) 是边界 Γ 上的单位外法向量. $J(y, u)$ 中的常数 $1/2$ 不会对问题的解产生影响.

首先我们以上面的模型为例, 介绍 PDE 约束优化问题的相关要素: (1) 可以进行优化的控制变量和随着控制变化而变化的状态变量, 在本例中控制变量就是散热器的温度 $u(x)$, 状态变量就是 CPU 的表面温度 $y(x)$; (2) 需要极小化的目标泛函, 这是约束优化问题需要优化的目标, 在本例中就是泛函 $J(y, u)$; (3) PDE 形式的等式约束, 是用于描述控制与状态之间关系的 PDE, 被称为问题的状态约束, 在本例中就是(2.2); (4) 关于控制的不等式约束, 被称为约束优化问题的控制约束, 在约束优化问题中也可以没有控制约束, 在本例中控制约束就是(2.3), 这种双边不等式约束也被称为 BOX-约束.

观察问题 (2.1) – (2.3), 我们可以发现, 目标泛函 $J(y, u)$ 是二次的, 约束方程 (2.2) 是一个线性椭圆型 PDE, 并且控制作用在整个求解区域 Ω 上, 所以问题 (2.1) – (2.3) 是一个二次线性椭圆型分布控制问题.

第3章 数学模型的最优性理论

本章我们将对问题 (2.1)–(2.3) 解的存在唯一性进行讨论, 首先, 在一定的假设条件下利用 PDE 弱解的存在唯一性理论得到 PDE 约束 (2.2) 弱解的存在唯一性, 然后结合目标泛函 (2.1) 的相关性质, 说明约束优化问题解的存在唯一性.

为了更好地研究问题 (2.1)–(2.3) 的适定性和一阶最优性条件, 接下来我们做出一些常规假设.

假设 3.1 问题 (2.1)–(2.3) 中的求解区域、函数空间和相关参数满足:

- (1) Ω 是 $\mathbb{R}^2$ 中的有界 Lipschitz 区域.
- (2) 目标泛函 (2.1) 中的理想状态 $y_\Omega \in L^2(\Omega)$.
- (3) 正则化系数 λ 为常数且 $\lambda \geq 0$.
- (4) 由于 CPU 表面积较小, 所以我们假设 CPU 表面各个点的导热率相同, 即 $\alpha(x)$ 为常函数, 且 $\alpha(x)$ 在 Γ 上几乎处处非负.
- (5) 相关系数函数 $\beta(x), \gamma(x) \in L^\infty(\Omega)$, 且 $\gamma(x)$ 在 Ω 上几乎处处不等于 0.
- (6) u_a 和 u_b 都是常数, 并且 $u_a \leq u_b$.
- (7) 状态函数空间为 $Y = H^1(\Omega)$, 控制的可行集为 $U_{ad} = \{u \in L^2(\Omega) \mid u_a \leq u(x) \leq u_b, \text{ a.e. } x \in \Omega\}$, 即

$$y(x) \in Y, \quad u(x) \in U_{ad}. \quad (3.1)$$

(8) 由于 CPU 只有边缘处与外界进行热量交换, 所以我们只考虑与 CPU 边缘相接触的外界的温度, 即 $y_a(x)$ 的定义域为边界 Γ , 并且由于 CPU 体积很小, 边缘不同点处的外界温度可以视为相同, 所以 $y_a(x)$ 为常函数.

以上内容仅为本文档的试下载部分，为可阅读页数的一半内容。如要下载或阅读全文，请访问：<https://d.book118.com/018065122071006046>