

求解约束插值和光顺问题的信赖域方法^{*}

覃 廉, 关履泰, 谢骊玲

(中山大学科学计算与计算机应用系, 广东 广州 510275)

摘要: 针对凸插值、凸光顺和保形插值等带约束条件的插值和光顺问题, 提出一种信赖域方法。约束插值和光顺问题可归结为求解半光滑非线性方程组。本文利用半光滑方程组的广义雅可比矩阵, 采用半光滑方程组的平方自然残余量作为价值函数。同时, 利用关履泰(1983)关于凸集上样条函数的性质, 改进信赖域方法, 以加速信赖域方法的迭代。本文证明了求解约束插值和光顺问题的信赖域方法的局部收敛性和全局收敛性, 最后给出了数值算例。

关键词: 凸插值; 凸光顺; 保形插值; 信赖域; 半光滑方程组; 外射集

中图分类号: O24 **文献标识码:** A **文章编号:** 0529-6579 (2005) S1-0146-06

带约束条件的曲线曲面的插值和逼近问题是数值逼近领域中十分重要的一个研究课题。由于物理、化学、生物、经济、机械设计等领域中, 许多逼近问题都是具有一定的先验知识, 对逼近的曲线曲面有一定的约束要求, 最常见的有保凸、保单调、保形、保正等等。

各种约束插值和逼近问题一般是非光滑的, 用传统的方法难以求解。Dontchev 等^[1-4]利用 Qi 等^[5]的非光滑牛顿法的超线性(平方)收敛性质理论, 用非光滑牛顿法求解了凸插值、凸光顺和保形插值问题。牛顿法具有很快的局部收敛速度, 当非光滑方程组满足半光滑条件时具有超线性收敛速度, 当满足强半光滑条件时具有二阶收敛速度。此外, 为了获得全局收敛性, Dontchev 等采用了一维搜索策略, 为了防止牛顿法的广义雅可比矩阵不定时数值计算不稳定, 采用了转换方向法或修正牛顿法, 以确保全局收敛性。

本文采用具有更好全局收敛性的信赖域方法, 在保证强局部收敛性的同时, 替代一维搜索和修正牛顿法。同时, 利用关履泰^[6]关于凸集上样条函数的性质, 改进信赖域方法, 以加速信赖域方法的迭代。证明了约束插值和光顺问题的信赖域方法的局部收敛性和全局收敛性, 最后给出了数值算例。

首先介绍本文将要用到的几个重要定义:

设 $F: \mathbf{R}^n \supset U \rightarrow \mathbf{R}^n$ 是局部 Lipschitz 连续函数。根据 Rademacher 的理论, F 是几乎处处可微的。用 DF 表示 F 可微的自变量点集。那么

$$\partial_B F(x) = \{ \lim_{x^k \rightarrow x} \nabla F(x^k)^T \}$$

Clarke 定义的广义雅可比矩阵为

$$\mathcal{F}(x) = \text{conv } \partial_B F(x)$$

如果 F 在 x 的方向导数存在, 对所有的 $V \in \mathcal{F}(x+h)$, 当 $h \rightarrow 0$ 时, 有

$$F(x+h) - F(x) = Vh + o(\|h\|)$$

则称 F 是半光滑的。如果上式中 $o(\|h\|)$ 换成 $O(\|h\|^2)$, 则称 F 是强半光滑的。

1 带约束条件的插值和光顺问题

给定节点 $a = t_1 < t_2 < \dots < t_{N+2} = b$ 和对应的值 $y_i = f(t_i)$, $i = 1, \dots, N+2$, $N \geq 3$

(1) 凸插值问题

$$\min \|f''\|_2$$

$$\text{s. t. } f(t_i) = y_i, i = 1, 2, \dots, N+2$$

$$f'' \geq 0, f \in W^{2,2}[a, b]$$

(2) 凸光顺问题

$$\min \|f''\|_2 + \sum_{i,j=1}^{N+2} q_{ij}(f(t_i) - y_i)(f(t_j) - y_j)$$

$$\text{s. t. } f'' \geq 0, f \in W^{2,2}[a, b]$$

(3) 保形插值问题

$$\min \|f''\|_2$$

$$\text{s. t. } f(t_i) = y_i, i = 1, 2, \dots, N+2$$

$$f''(t) \geq 0 \quad t \in \Omega_1,$$

$$f''(t) \leq 0 \quad t \in \Omega_2, f \in W^{2,2}[a, b]$$

根据文 [1-3], 问题 (1) - (3) 可以转化为

^{*} 收稿日期: 2004-12-02

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (60475042); 广东省自然科学基金重点资助项目 (036608); 香港中山大学高等学术研究中心基金会资助

作者简介: 覃廉 (1979年生), 男, 博士研究生; E-mail: qin_lian@126.com

求解非线性方程组。

问题 (1) 等价于求解

$$H(\lambda) = F(\lambda) - d = 0$$

其中, d 的第 i 个分量为

$$d_i = (t_{i+2} - t_i)[t_i, t_{i+1}, t_{i+2}]f, i = 1, 2, \cdots, N$$

F 的第 i 个分量为

$$F_i(\lambda) = \int_a^b \left(\sum_{l=1}^N \lambda_l B_l(t) \right)_+ B_i(t) dt, \\ i = 1, 2, \cdots, N;$$

问题 (2) 等价于求解

$$H(\lambda) = F(\lambda) + KQ^{-1}K^T\lambda - Ky = 0$$

其中, $Ky = d$, d 的第 i 个分量和 F 的第 i 分量同
问题 (1)。

问题 (3) 等价于求解

$$H(\lambda) = F(\lambda) - d = 0$$

其中, d 的第 i 个分量为

$$d_i = (t_{i+2} - t_i)[t_i, t_{i+1}, t_{i+2}]f, i = 1, 2, \cdots, N$$

F 的第 i 个分量为

$$F_i(\lambda) = \int_{[t_i, t_{i+2}] \cap \Omega_1} \left(\sum_{l=1}^N \lambda_l B_l(t) \right)_+ B_i(t) dt - \\ \int_{[t_i, t_{i+2}] \cap \Omega_2} \left(\sum_{l=1}^N \lambda_l B_l(t) \right)_- B_i(t) dt + \\ \int_{[t_i, t_{i+2}] \cap \Omega_3} \left(\sum_{l=1}^N \lambda_l B_l(t) \right) B_i(t) dt, \\ i = 1, 2, \cdots, N \\ \Omega_1 = \{ [t_i, t_{i+1}] \mid d_{i-1} > 0, d_i > 0 \} \\ \Omega_2 = \{ [t_i, t_{i+1}] \mid d_{i-1} < 0, d_i < 0 \} \\ \Omega_3 = \{ [t_i, t_{i+1}] \mid d_{i-1}d_i < 0 \}$$

以上的非线性方程组

$$H(\lambda) = 0 \tag{1}$$

均为非光滑的, 使用传统的方法难以求解。文 [4] 证明了问题(1) – (3) 的非线性方程组 $H(\lambda)$ 都是强半光滑的, [1–4] 用非光滑牛顿法求解上述半光滑非线性方程组: 选取 $V_k \in \mathcal{H}(\lambda^k)$, 作牛顿迭代

$$\lambda^{k+1} = \lambda^k - V_k^{-1}H(\lambda^k) \tag{2}$$

其中, 广义雅可比矩阵 V_k 可以这样取:

对问题 (1), 记

$$(M(\lambda))_{ij} = \int_a^b \left(\sum_{l=1}^N \lambda_l B_l(t) \right)_+ B_i(t) B_j(t) dt, \\ i, j = 1, 2, \cdots, N$$

则对任意 $\lambda \in \mathbf{R}^N$, $M(\lambda) \in \mathcal{H}(\lambda)$

对问题 (2), 记

$$(M(\lambda))_{ij} = \int_a^b \left(\sum_{l=1}^N \lambda_l B_l(t) \right)_+ B_i(t) B_j(t) dt, \\ i, j = 1, 2, \cdots, N$$

则对任意 $\lambda \in \mathbf{R}^N$, $M(\lambda) \in \mathcal{H}(\lambda)$, 并且 $M(\lambda) + KQ^{-1}K^T \in \mathcal{H}(\lambda)$ 。

对问题 (3), 记

$$(M(\lambda))_{ij} = \int_a^b P(\lambda, t) B_i(t) B_j(t) dt \\ i, j = 1, 2, \cdots, N$$

其中,

$$P(\lambda, t) = \left(\sum_{l=1}^N \lambda_l B_l(t) \right)_+ \chi_{\Omega_1}(t) + \\ \left(\sum_{l=1}^N \lambda_l B_l(t) \right)_- \chi_{\Omega_2}(t) + \chi_{\Omega_3}(t)$$

则对任意 $\lambda \in \mathbf{R}^N$, $M(\lambda) \in \mathcal{H}(\lambda)$ 。

非光滑牛顿法具有较好的局部收敛性。因为上述各问题中的 $H(\lambda)$ 是强半光滑的, 文 [4] 证明了当 λ 充分靠近稳定点 λ^* 时, 迭代序列的收敛速度是二阶的。在全局收敛性方面, 采用了一维线性搜索的方法来保证方法是全局收敛的。另外, 在数值计算过程中, 当 V_k 不正定时, 会出现计算不稳定的情况。当这种情况出现时, 文献采用了转换方向为最速下降方向的方法或者修正牛顿法, 即让牛顿方向偏向最速下降方向, 也就是用 $V_k + eI$ 代替 V_k ($e > 0$)。虽然这样的策略是成功的, 但是它有一个缺点, 即没有进一步利用 n 维的二次模型。

2 求解约束插值和光顺问题的信赖域方法

本文将采用另一种保证总体收敛性的方法——信赖域方法, 它不仅可以用来代替一维搜索, 而且可以解决广义雅可比矩阵 V_k 不正定和 λ_k 为鞍点等困难。该方法之前被 Jiang 等用来解广义互补问题, Qi 等用来解带约束条件的非线性方程组, Ulbrich 用来解带边值约束的半光滑方程组。同时, 利用关履泰 (1983)^[9] 关于凸集上样条函数的性质, 对信赖域方法进行改进, 以加速信赖域方法的迭代。

定义价值函数

$$\phi(\lambda) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N [H_i(\lambda)]^2 = \frac{1}{2} \|H(\lambda)\|_2^2 \tag{3}$$

则解非线性方程组 (1) 等价于求解下面非线性最小二乘问题的全局最小点:

$$\min_{\lambda \in \mathbf{R}^N} \phi(\lambda) = \min_{\lambda \in \mathbf{R}^N} \frac{1}{2} \|H(\lambda)\|_2^2 \tag{4}$$

虽然 $H(\lambda)$ 通常不是连续可微的, 但是在空间 $\mathbf{R}^N$ 上, 价值函数 $F(\lambda)$ 是连续可微的。显然, 对任意 $\lambda \in \mathbf{R}^N$ 和 $V \in \mathcal{H}(\lambda)$

$$\nabla \phi(\lambda) = V^T H(\lambda) \tag{5}$$

至此, 可以使用普通的信赖域方法来求解。

如果应用关履泰 (1983) 关于凸集上样条函数

的性质, 可以对信赖域方法进行改进.

首先给出外射集的定义, 以及凸集上样条函数的一些性质:

定义 1 设 $G_1 \in G$, A 是 G_1 表面 ∂G_1 上的一点, 称 G 的子集 G 为点 A 关于 G_1 和 G 的外射集, 如果连接 A 与 G 中任一点 B 的线段与 G_1 仅交于 A 点.

根据定义, 显然有:

(1) G 是 A 的外射集当且仅当 $\forall B \in G, 0 < \lambda < 1$ 有 $x = \lambda B + (1 - \lambda)A \notin G_1$.

(2) A 的外射集正好是 G_1 在 A 点切超平面的外半空间与集合 G 的交集.

引理 2 σ_1 和 σ 分别是在凸集 C_1 和 C 上关于 t 的唯一的样条函数, $C_1 \subset C$, 那么 σ 一定在 σ_1 关于 C_1 和 C 的外射集中.

引理 2 的证明见文献 [6].

定理 3 最优化问题 (1) - (3) 的可行域均为闭凸集.

证明 对问题 (1), 可行域为集合

$$K: = \{f \mid f(t_i) = y_i (i = 1, 2, \dots, N+2), \\ f'' \geq 0, f \in W^{2,2}[a, b]\}$$

对 $\forall f_1, f_2 \in K$, 有

$$f_1(t_i) = y_i (i = 1, 2, \dots, N+2), \\ f_1'' \geq 0, f_1 \in W^{2,2}[a, b]; \\ f_2(t_i) = y_i (i = 1, 2, \dots, N+2), \\ f_2'' \geq 0, f_2 \in W^{2,2}[a, b];$$

对 $\forall \alpha \in [0, 1]$ 令 $f_3 = \alpha f_1 + (1 - \alpha)f_2$,

$$f_3(t_i) = \alpha f_1(t_i) + (1 - \alpha)f_2(t_i)$$

$$\alpha y_i + (1 - \alpha)y_i = y_i \quad (i = 1, 2, \dots, N+2)$$

$$f_3'' = \alpha f_1'' + (1 - \alpha)f_2'' \geq 0$$

$$f_3 = \alpha f_1 + (1 - \alpha)f_2 \in W^{2,2}[a, b]$$

因此 $f_3 \in K$, 故 K 为凸集.

假设序列 $\{f_n\} \in K$, $\lim_{n \rightarrow \infty} f_n = f_0$, 则对所有 n 有 $f_n(t_i) = y_i (i = 1, 2, \dots, N+2)$, $f_n'' \geq 0$, $f_n \in W^{2,2}[a, b]$, 因为 $\lim_{n \rightarrow \infty} f_n = f_0$, 所以

$$f_0(t_i) = y_i (i = 1, 2, \dots, N+2), f_0 \in W^{2,2}[a, b],$$

又因为 $\lim_{n \rightarrow \infty} f_n'' = f_0''$, $f_n'' \geq 0$, 所以 $f_0'' \geq 0$.

因此, $f_0 \in K$, K 为闭集.

同理, 最优化问题 (2) 的可行域

$$K: = \{f \mid f'' \geq 0, f \in W^{2,2}[a, b]\}$$

和最优化问题 (3) 的可行域

$$K: = \{f \mid f(t_i) = y_i (i = 1, 2, \dots, N+2), \\ f''(t) \geq 0, t \in \Omega_1; f''(t) \leq 0, t \in \Omega_2, f \in W^{2,2}[a, b]\}$$

也是闭凸集.

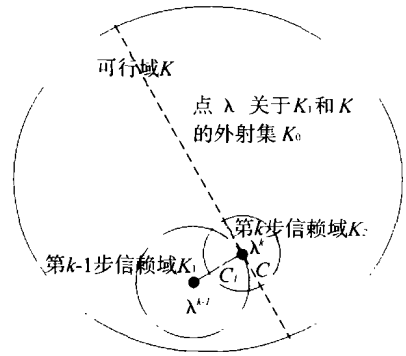


图 1 第 $k-1, k$ 步信赖域、外射集示意图

Fig 1 Trust region and outer projection set of step $k-1$ and step k

定理 4 在普通信赖域方法中, 假设求解第 $k-1$ 步信赖域子问题得到信赖域 K_1 内的局部最优解 λ^k (图 1), 则第 k 步信赖域子问题的局部最优解 λ^{k+1} 一定在第 k 步信赖域 K_2 (以 λ^k 为球心的广义球) 与点 λ^k 关于 K_1 和 K 的外射集 K_0 的交集 C (即半球) 中.

证明 由定理 3, 最优化问题 1、2、3 的可行域均为闭凸集. 如图 1, λ^k 是信赖域 K_1 内关于 t 的惟一样条函数, 即 λ^k 也是 C_1 ($C_1 = K_1 \cap K_2$) 内关于 t 的惟一样条函数. 显然 K_2, C_1 都是闭凸集, $C_1 \subset K_2$, 根据引理 2, 信赖域 K_2 内关于 t 的惟一样条函数 λ^{k+1} 一定在 λ^k 关于 C_1 和 K_2 的外射集 C (即半球) 中.

根据定理 4, 可以对普通的信赖域方法作进一步改进. 在每次迭代计算信赖域子问题时多加一个约束条件, 将信赖域缩小为原来的一半, 使收敛速度更快. 该方法曾经被文献 [8] 采用以改进线性规划的 Karmarkar 方法.

于是, 我们得到改进的信赖域算法:

算法 5

步骤 0 (初始化): 选取 $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \rho_1, \rho_2, \Delta_{\min}, \Delta_1$ 使得 $0 < \alpha_1 < \alpha_2 < 1 < \alpha_3 < \alpha_4, 0 < \rho_1 < \rho_2 < 1, \Delta_{\min} > 0, \Delta_1 > 0$. 取 $\lambda' \in \mathbf{R}^N$ 为起始点, 设 $k := 1$.

步骤 1 (终止判断):

如果 $\nabla \phi(\lambda^k) = 0$, 停止.

否则, $\Delta = \max(\Delta_{\min}, \Delta_k)$, 选择 $V_k \in \partial_b H(\lambda^k)$

步骤 2 (信赖域子问题):

求解

$$\min \nabla \phi(\lambda^k)^T s + \frac{1}{2} s^T V_k^T V_k s \\ \text{s.t.} \quad \|s\| \leq \Delta \quad (6)$$

得到 s , 如果 $k=1$ 或者 $\|s\| < \Delta$, 则 $s' := s$;

否则求下面最小化问题的解 s'

$$\begin{aligned} \min \quad & \nabla \phi(\lambda^k)^T s + \frac{1}{2} s^T V_k^T V_k s \\ \text{s. t.} \quad & \|s\| \leq \Delta, \\ & s_0^T s \geq 0 \end{aligned} \tag{7}$$

如果 $s' \neq s$ 且 $\phi(\lambda^k + s) < \phi(\lambda^k + s')$, 则 $s' := s$
步骤 3 (信赖域半径修正):

$$\text{令 } r := \frac{\phi(\lambda^k + s') - \phi(\lambda^k)}{\frac{1}{2} \|H(\lambda^k) + V_{ks}\|_2^2 - \phi(\lambda^k)} \tag{8}$$

如果 $r \geq \rho_1$, 则 $s^k := s'$, $\lambda^{k+1} := \lambda^k + s^k$. $S_0 := S^k$, $\hat{\Delta} := \Delta$, 取固定的 $\alpha \in [\alpha_3, \alpha_4]$,
$$\Delta_{k+1} = \begin{cases} \Delta & \text{if } \rho_1 \leq r \leq \rho_2; \\ \alpha \Delta & \text{if } r \geq \rho_2 \end{cases}$$

$k := k + 1$, 转步骤 1.

否则, 选取 $\Delta \in [\alpha_1 \Delta, \alpha_2 \Delta]$, $\Delta = \Delta$, 转步骤 2.

注 意

(1) 算法 5 与经典的信赖域算法不同之处在于每次迭代的信赖域半径的选取. 算法 5 每次信赖域半径取值总是大于某一固定值 $\Delta_{\min}$, 而不是仅仅根据上一次迭代的信赖域半径修改得到, 这使得在精确解附近信赖域方法有局部二次的收敛速度 (文献 [7] 引理 6).

(2) 式(7) 中, s 表示本次迭代的步长, s_0 表示上一次迭代的步长. (7) 比 (6) 多增加了一个约束条件, 使迭代时本次步长方向与上一次步长方向的夹角不超过 90 度. 这是一种限制方向的信赖域方法.

(3) 当 λ^k 靠近精确解 λ^* 时, 算法转变为非光滑牛顿法, 此时收敛速度已经非常快, 外射集约束误差也比较大, 因此不必使用外射集约束. 所以当信赖域约束为非积极约束时, 也去掉外射集约束.

(4) 在步骤 2 中, 信赖域子问题可能同时要解 (6) 式和 (7) 式, 两式相差一个约束条件, 推荐使用积极集法.

(5) 由等式 (5), 显然, 对 $\forall s \in \mathbf{R}^N$, 有

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \|H(\lambda^k) + V_{ks}\|_2^2 - \phi(\lambda^k) = \\ \nabla \phi(\lambda^k)^T s + \frac{1}{2} s^T V_k^T V_k s \end{aligned}$$

(6) 算法步骤 1 中 V_k 的取法:

问题 (1): $V_k = M(\lambda^k)$

问题 (2): $V_k = M(\lambda^k) + KQ^{-1}K^T$

问题 (3): $V_k = M(\lambda^k)$

(7) 每次迭代计算信赖域子问题得到的局部最优解并不是信赖域内的精确最优解, 所以外射集约束并不是精确的. 因而, 在求解 (7) 式时如果外射集约束是积极约束, 则对 (6) 式和 (7) 式的解进行比较, 选择下降量大的解作为本次的迭代步.

(8) 步骤 3 中 (8) 式分母中的 s 使用的是 (6) 式的解, 而不是 (7) 式的解. 这样分母表示信赖域内的预测最大下降量, 分子表示实际下降量, 这样通过 r 的值来调节信赖域半径能保证算法的整体收敛性 (定理 11).

3 算法收敛性

定理 6 算法 5 不可能在第 2 步和第 3 步之间无限循环, 除非 λ^k 是 $\Phi(\lambda)$ 的稳定点.

证明 类似文献 [7] 定理 3.1 的证明, 利用 $\phi(\lambda^k + s) \geq \phi(\lambda^k + s')$, 即可得证.

根据文献 [1-3], 有如下引理 7.

引理 7 对问题 (1)、(2)、(3), 存在 λ^* 的邻域 $\Omega(\lambda^*)$, 对 $\forall \lambda \in \Omega(\lambda^*)$, 如果 $V \in \mathcal{F}(\lambda)$, 那么 V 是非奇异矩阵.

引理 8^[7] 如果 s 是最小化问题 (6) 的解, 那么

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \|H(\lambda^k) + V_{ks}\|_2^2 - \phi(\lambda^k) \leq \\ \frac{1}{2} \|\nabla \phi(\lambda^k)\|_2 \min \left\{ \frac{\Delta}{c}, \frac{\|\nabla \phi(\lambda^k)\|_2}{\|V_k^T V_k\|_2} \right\} \end{aligned}$$

其中, c 是一个常数, 对 $\forall y \in \mathbf{R}^n$ $\|y\| \leq c \|y\|_2$.

引理 9 算法 5 中, 假设 λ^* 是子序列 $\{\lambda^k\}_{k \in K}$ 的极限. 如果 λ^* 不是 $F(\lambda)$ 的稳定点, 那么必存在 k' 和 $\Delta > 0$, 使对 $\forall k \geq k'$ ($k \in K$), 只要 $\Delta \in (0, \Delta)$, 有

$$r := \frac{\phi(\lambda^k + s') - \phi(\lambda^k)}{\frac{1}{2} \|H(\lambda^k) + V_{ks}\|_2^2 - \phi(\lambda^k)} \geq \rho_1$$

其中, s 是 (6) 式的解, s' 是 (7) 式的解.

证明 由文献 [7] 引理 5.2, 对 (6) 式的解 s , 结论成立, 即

$$\frac{\phi(\lambda^k + s) - \phi(\lambda^k)}{\frac{1}{2} \|H(\lambda^k) + V_{ks}\|_2^2 - \phi(\lambda^k)} \geq \rho_1$$

又因为 $\phi(\lambda^k + s) \geq \phi(\lambda^k + s')$, $\frac{1}{2} \|H(\lambda^k) + V_{ks}\|_2^2 - \phi(\lambda^k) < 0$, 所以

$$\begin{aligned} \frac{\phi(\lambda^k + s') - \phi(\lambda^k)}{\frac{1}{2} \|H(\lambda^k) + V_{ks}\|_2^2 - \phi(\lambda^k)} \geq \\ \frac{\phi(\lambda^k + s) - \phi(\lambda^k)}{\frac{1}{2} \|H(\lambda^k) + V_{ks}\|_2^2 - \phi(\lambda^k)} \end{aligned}$$

结论成立。

引理 10 算法 5 中, 假设 λ^* 是子序列 $\{\lambda^k\}_{k \in K}$ 的极限。如果 λ^* 不是 $F(\lambda)$ 的稳定点, 那么

$$\liminf_{k \in K, k \rightarrow \infty} \hat{q} > 0$$

证明类似文献 [7] 引理 5.3。

定理 11 假设 $\{\lambda^k\}$ 是算法 5 产生的迭代序列, 那么 $\{\lambda^k\}$ 的聚点必是 $F(\lambda)$ 的稳定点, 因此, 也是相应的约束插值和光顺问题的解。

证明 假设 λ^* 是子序列 $\{\lambda^k\}_{k \in K}$ 的聚点, 即

$$\lim_{k \in K, k \rightarrow \infty} \lambda^k = \lambda^*$$

如果 λ^* 不是 $F(\lambda)$ 的稳定点, 又因为 ∂H 是上半连续的, 必存在 $\beta_1 > 0, \beta_2 > 0$, 使得

$$\|\nabla \phi(\lambda^k)\|_2 \geq \beta_1, \frac{\|\nabla \phi(\lambda^k)\|_2}{\|V_k^T V_k\|_2} \geq \beta_2$$

由引理 10, 必存在 $\delta > 0$ 以及 k' , 对 $\forall k \geq k' (k \in K)$, $\hat{q} \geq \hat{q}$

由算法 5, 因为 $F(\lambda)$ 是非负的, 有

$$\begin{aligned} \phi(\lambda^1) &\geq \sum_{k=1}^{\infty} [\phi(\lambda^k) - \phi(\lambda^{k+1})] \geq \\ &\sum_{k=1}^{\infty} \rho_1 [\phi(\lambda^k) - \frac{1}{2} \|H(\lambda^k) + V_k s^k\|_2^2] \geq \\ &\sum_{k \geq k', k \in K} \rho_1 [\phi(\lambda^k) - \frac{1}{2} \|H(\lambda^k) + V_k s^k\|_2^2] \geq \\ &\rho_1 \sum_{k \geq k', k \in K} \frac{1}{2} \|\nabla \phi(\lambda^k)\|_2 \min \left\{ \frac{\hat{q}}{c}, \frac{\|\nabla \phi(\lambda^k)\|_2}{\|V_k^T V_k\|_2} \right\} \geq \\ &\rho_1 \sum_{k \geq k', k \in K} \frac{1}{2} \beta_1 \min \left\{ \frac{\delta}{c}, \beta_2 \right\} \geq \\ &\frac{1}{2} \rho_1 \beta_1 \sum_{k \geq k', k \in K} \min \left\{ \frac{\delta}{c}, \beta_2 \right\} = \infty \end{aligned}$$

矛盾。因此, λ^* 是 $F(\lambda)$ 的稳定点。

定理 12 算法 5 产生的迭代序列 $\{\lambda^k\}$ 以二阶的收敛速度收敛到 λ^* 。

证明 根据算法 5 中步骤 2 的策略, $\phi(\lambda^{k+s}) \geq \phi(\lambda^{k+s'})$ 。与文献[7]引理 6 证明类似, 因为问题(1)、(2)、(3)中的 $H(\lambda)$ 是强半光滑的, 根据文献[9]中的定理 3.1, $\{\lambda^k\}$ 以二阶的收敛速度收敛到 λ^* 。

4 数值试验

算法使用 Matlab6.5 实现, 算法 5 中参数初始化为 $\Delta_{\min}=1.0, \Delta_1=100, \rho_1=10^{-4}, \rho_2=0.75$ 。信赖域半径修改规则是:

如果 $r \geq \rho_2, \Delta_{k+1}=2\Delta$;
如果 $r < \rho_1, \Delta_{k+1}=\Delta/2$; 否则 $\Delta_{k+1}=\Delta$ 。

算例 1 (凸插值问题)

t	0	0.1	0.4	0.7	0.8	1
y	0.0215	0	-0.0070	-0.0065	-0.0055	0.0315

算例 2 (凸插值问题)

$$t = [0, 0.08, 0.36, 0.65, 0.8, 0.96],$$
$$y = \frac{1}{(0.05 + t)(1.05 - t)}$$

算例 3 (凸插值问题)

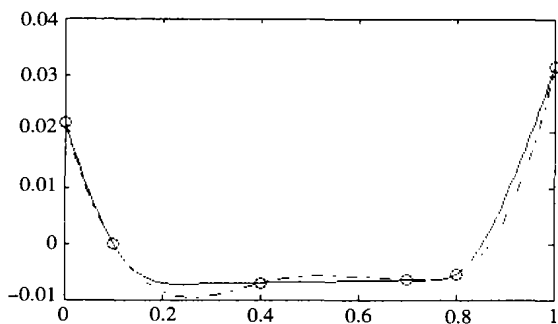
$$t = [-0.9, -0.7, -0.5, -0.3, -0.1],$$
$$y = \frac{1}{t^2}$$

算例 4 (凸光顺问题)

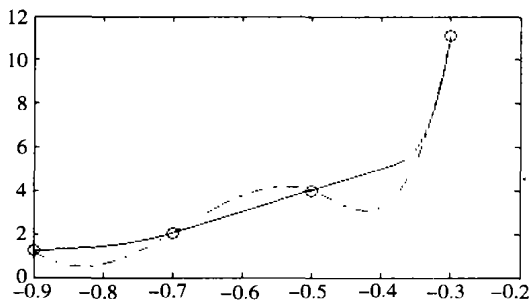
t	0	0.2	0.4	0.6	0.8	1	1.2	1.4
y	1	0.5	0.3	0.4	0.4	0.3	0.5	1

试验结果:

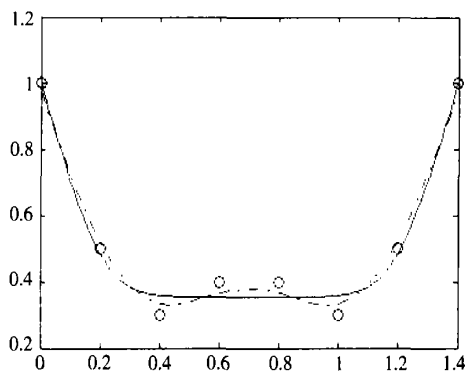
	初值 λ_0	信赖域法迭代次数	外射集约束极次数	$\ F(\lambda^f) - d\ $	修正牛顿法迭代次数	一般牛顿法迭代次数
算例 1	[1, 1, 1, 1]	5	0	5.79e-17	9	5
	[0, 0, 0, 0]	6	0	2.78e-17	9	5
	[-1, -1, -1, -1]	7	1	3.47e-18	10	失败
	[-100, -100, 100, 100]	8	2	3.88e-18	10	失败
算例 2	[1, 1, 1, 1]	10	1	8.88e-16	10	7
	[0, 0, 0, 0]	8	1	8.88e-16	10	7
	[-1, -1, -1, -1]	10	3	7.11e-15	13	失败
	[-1, -1, 1, 1] * 1e10	20	5	1.47e-14	失败	失败
算例 3	[1, 1, 1]	8	1	2.27e-13	14	6
	[0, 0, 0]	12	2	5.70e-14	14	6
	[-1, -1, -1]	13	3	5.70e-14	15	失败
	[-1, -1, 1] * 1e10	30	5	5.70e-14	失败	失败
算例 4	[1, 1, 1, 1, 1, 1]	12	2	2.60e-16	13	7
	[0, 0, 0, 0, 0, 0]	10	2	9.39e-16	13	6
	[-1, -1, -1, -1, -1, -1]	9	2	2.60e-16	14	失败
	[1, 1, 1, 1, 1, 1] * 1e10	12	3	9.40e-16	16	6
	[-1, -1, 1, 1, 1, -1] * 1e10	18	3	9.71e-16	21	失败



算例 1 (实线表示凸插值, 虚线表示三次自然样条插值)



算例 3 (实线表示凸插值, 虚线表示三次自然样条插值)



算例 4 (实线表示凸光顺, 虚线表示三次自然样条光顺)

参考文献:

- [1] DONTCHEV A L, QI H D, QI L. Convergence of Newton's Method for Convex Best Interpolation[J]. Numer Math, 2001, 87: 435—456.
- [2] DONTCHEV A L, QI H D, QI L. Quadratic convergence of Newton's method for convex interpolation and smoothing[J]. Constr Approx, 2003, 19: 123—143.
- [3] DONTCHEV A L, QI H D, QI L, et al. A Newton method for shape-preserving interpolation[R]. Technical Report, School of Mathematics, the University of New South Wales, Sydney 2052, Australia, August 2001.
- [4] DONTCHEV A L, QI H D, QI L. Quadratic convergence of Newton's method for constrained interpolation[C]. //CHUI C K, SCHUMAKER L L, STOECKLER J. Approximation Theory X: Wavelets, Splines and Applications Nashville, TN, USA. Vanderbilt University Press, 2002, 261—270.
- [5] QI L, SUN J. A nonsmooth version of Newton's method[J]. Math Programming, 1993, 53: 353—367.
- [6] 关履泰. 凸集上样条函数的一些新性质[J]. 应用科学学报, 1983, 1(3): 10—18.
- [7] JIANG H, FUKUSHIMA M, QI L, SUN D. A Trust Region Method for Solving Generalized Complementarity Problems[J]. SIAM Journal on Optimization, 1998, 8: 140—157.
- [8] 关履泰, 龚大平, 陈辉汉. 用线性分式规划的多项式算法改进线性规划的 Kamarkar 方法[J]. 工程数学学报, 1990, 7(1): 1—7.
- [9] QI L. Convergence analysis of some algorithms for solving nonsmooth equations[J]. Math Oper Res, 1993, 18: 227—244.

Constrained Interpolation and Smoothing Problems Solved by a Trust Region Algorithm

QIN Lian, GUAN Lu-tai, XIE Li-ling

(Department of Scientific Computation and Computer Applications, Sun Yat-sen University, Guangzhou 510275, China)

Abstract: This paper presents a trust region algorithm for solving the constrained interpolation and smoothing problems such as convex interpolation, convex smoothing and shape-preserving interpolation. All these problems can be reduced to semismooth nonlinear systems. Apply a generalized Jacobian of the function involved in semismooth equation and adopt the squared natural residual of the semismooth equation as a merit function. Furthermore, the trust region method is improved by the properties of the spline on a convex set, hence it can be speeded up the iteration of the trust region method. The local and global convergence of the trust region method in constrained interpolation and smoothing problems is shown. The end of the paper presents some numerical examples.

Key words: convex interpolation; convex smoothing; shape-preserving interpolation; trust region; semismooth equations; outer projection set