

用牛顿法求解凸集上的一类最佳插值问题^{*}

谢骊玲, 关履泰

(中山大学科学计算与计算机应用系, 广东 广州 510275)

摘要: 讨论一般的最佳插值问题 ($k \geq 3$): $\min \int_a^b |D^k f|^2 dt$, f 满足插值条件 $f(t_i) = y_i, i = 1, \dots, n$ 和约束 $f^{(k)} \geq 0$ 。该问题可转化为非线性方程组, 从而用半光滑牛顿型算法求解, 算法具超线性收敛性。然后给出一个由函数的 k 阶导数计算求得原函数的算法。算例显示了所有算法的有效性。

关键词: 广义牛顿法; 半光滑; 超线性收敛性; 最佳凸插值

中图分类号: O174.42, O241.7 **文献标识码:** A **文章编号:** 0529-6579 (2005) S1-0122-04

1 引言

考虑下面的闭凸集上的最佳凸插值问题:

问题 I

$$\begin{aligned} \min & \|f^{(k)}\|_p \\ \text{s. t. } & f(t_i) = y_i, \\ & i = 1, 2, \dots, n, \\ & f^{(k)} \geq 0, f \in W^{k,p}[a, b] \end{aligned}$$

其中, $a = t_1 < t_2 < \dots < t_n = b$ 和 $y_i, i = 1, \dots, n$ 是给定的数据, $\|\cdot\|_p$ 是 Lebesgue 空间 $L^p[a, b]$ 的范数, $W^{k,p}[a, b]$ 是 Sobolev 空间, 满足

$$\begin{aligned} W^{k,p}[a, b] &= \{f \in [a, b] \mid f^{(j)} \\ &\text{在 } [a, b] \text{ 中绝对连续,} \\ &j = 0, \dots, k-1; f^{(k)} \in L^p[a, b]\} \end{aligned}$$

这是一类凸集上的样条函数问题, 它的存在和唯一性在 [1] 中已有讨论, 一般算法可归结为二次规划类型^[2]。文 [3] 在 $k = p = 2$ 时用广义牛顿法的算法求解该问题。自然, 解方程组比解规划问题要简单, 而且在收敛性及收敛阶等问题上能得到较好的理论结果。本文讨论比 [3] 更一般的问题, 文献 [4] 中有关于上述问题在 $p = 2$ 时的情况的讨论, 此时问题的惟一解 u^* 是 $2k$ 阶自然样条, 且 u^* 在闭凸集 $K := \{f \in W^{k,p} \mid f^{(k)} \geq 0\}$ 上。其中, 当 $k = 3, 4$ 时, 该问题的解分别是五次样条和七次样条, 这类样条在计算几何和多媒体的数据处理中有广泛的应用。本文把该问题转化为非线性方程组, 用广义牛顿法求解, 算法超线性收敛。算例

也表明算法简单, 而且效果很好。

2 非光滑方程组的构造

考虑到上述问题的解 $u^* \in K$, 如果 $[t_i, \dots, t_{i+k}] u^* > 0, i = 1, \dots, n-k$, 则由文献 [5] 中的式 (1.2) 可得

$$u^{*(k)} = \left[\sum_{l=1}^{n-k} \lambda_l B_{l,k}(t) \right]_+ \quad (1)$$

$$\int_a^b u^{*(k)} B_{j,k}(t) dt = d_j, j = 1, \dots, n-k \quad (2)$$

其中, $B_{j,k}$ 是支集为 $[t_j, t_{j+k}]$ 的规范 B 样条, $d_j = (t_{j+k} - t_j)(k-1) \prod_{i=1}^{k-1} [t_j, \dots, t_{j+k}] \hat{g}$ 。 $\hat{g}(t_j) = y_j, [t_j, \dots, t_{j+k}] \hat{g}$ 是 $\hat{g}$ 在 $t_j, \dots, t_{j+k}$ 上的 k 阶差商。式 (1) 代入式 (2), 可得

$$\begin{aligned} F_j(\lambda) &:= \int_a^b \left[\sum_{l=1}^N \lambda_l B_{l,k}(t) \right]_+ B_{j,k}(t) dt = d_j, \\ j &= 1, \dots, N, N = n-k \end{aligned} \quad (3)$$

所有方程 (3) 构成了含未知向量 λ 的非线性方程组, 求解这个方程组就可获得原问题的解。

3 广义牛顿迭代法

为了保证解的存在惟一性, 这里规定 $d_i = (t_{i+k} - t_i)(k-1) \prod_{i=1}^{k-1} [t_i, \dots, t_{i+k}] \hat{g} > 0, i = 1, \dots, n-k$ 。记已知数据 $\{y_i\}_{i=1}^n$ 为向量 $y = (y_1, \dots, y_n)^T$, k 阶差商算子为 D^k , 则 $D^0 := I \in \mathbf{R}^{n,n}, D^k := H^k L^k \dots H^1 L^1 \in \mathbf{R}^{n-k,n}$, H^v 和 L^v 分别定义如下:

$$H^v := \text{diag} \left(\frac{1}{t_{j+v} - t_j} \right)_{j=1, \dots, n-v} \in \mathbf{R}^{n-v, n-v},$$

* 收稿日期: 2005-01-11

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项目

作者简介: 谢骊玲 (1977年生), 女, 博士研究生; E-mail: xiells@163.com

$$L^v:=\begin{bmatrix}-1&1&&&&\\&-1&1&&&\\&&&\ddots&\ddots&\\&&&&-1&1\\&&&&&-1&1\end{bmatrix}$$

$\in R^{n-v, n-v+1}, v=1, \cdots, k,$

再记 $(n-k) \times (n-k)$ 的对角矩阵为 $T:=\text{diag}(t_{i+k}-t_i)_{i=\overline{1, n-k}} \in \mathbf{R}^{n-k, n-k}$ 。于是向量 $d=(d_1, \cdots, d_N)^T(N=n-k)$ 可由下式算出: $d=(k-1)!\mathcal{D}^k y$ 。利用如下的广义牛顿法即可求解方程 (3):

$$\lambda^{k+1}=\lambda^k-V_k^{-1}F(\lambda^k) \tag{4}$$

其中, $V_k \in \mathcal{Q}F(\lambda^k)$ 是 Clarke 定义的广义雅可比中的元素矩阵。 $\mathcal{Q}F(\lambda^k)$ 的非奇异性在某些情况下太严格了, 文献 [6] 将迭代法 (4) 中的广义雅可比 $\mathcal{Q}F(\lambda^k)$ 替换为 F 在点 λ 处的 B-导数 $\partial_B F(\lambda)$, 由于 $\mathcal{Q}F(x)=\text{conv } \partial_B F(x)$, 这就降低了对矩阵的非奇异性的要求。

下面我们把原始的带约束的最小化问题转化为无约束的最大化问题, 从而获得一种全局收敛的迭代法。由式 (2) 及 Lagrange 乘子法, 可得问题 I 的对偶问题为

$$\max_{\lambda \in \mathbf{R}^N} \left[-\frac{1}{2} \int_a^b \left(\sum_{i=1}^N \lambda_i B_{i,k}(t) \right)^2 dt + \sum_{i=1}^N \lambda_i d_i \right] \tag{5}$$

进一步可记

$$L(\lambda)=\frac{1}{2} \int_a^b \left(\sum_{i=1}^N \lambda_i B_{i,k}(t) \right)^2 dt - \sum_{i=1}^N \lambda_i d_i$$

算法 1 (S1) 选择 $\lambda^0 \in \mathbf{R}^N, \rho \in (0, 1), \sigma \in (0, \frac{1}{2})$, 容许误差 $\epsilon>0, k:=0$;

(S2) 如果 $\|F(\lambda^k)-d\| \leq \epsilon$ 则停止, 否则转 (S3);

(S3) 寻找下面线性方程组的解 s^k :
 $(M(\lambda^k)+\epsilon_k I)s=-\nabla L(\lambda^k) \tag{6}$

(S4) 寻找满足下面不等式的最小非负整数 m_k :
 $L(\lambda^k+\rho^m s^k)-L(\lambda^k) \leq \sigma^m \nabla L(\lambda^k)^T s^k$

(S5) $\lambda^{k+1}=\lambda^k+\rho^{m_k} s^k, k:=k+1$, 返回 (S2)。

其中 $M(\lambda^k)=\nabla F(\lambda^k)$ 是函数 F 在点 λ 的普通雅可比矩阵。由于 $M(\lambda^k) \in \mathcal{Q}F(\lambda^k)$ 是半正定的, 因此对任意 $\epsilon_k>0, M(\lambda^k)+\epsilon_k I$ 总是正定的, 这保证了方程组 (6) 惟一可解且解 $s^k \neq 0$ 。

4 算法的收敛性

本小节将证明各分量的定义如式 (3) 的向量函数 F 是半光滑的, 从而求解该方程组的广义牛

顿法超线性收敛。为下面的讨论方便, 记所有定义如 (3) 的 F_j 构成的向量函数为

$$F(\lambda)=(F_1(\lambda), \cdots, F_N(\lambda))^T, N=n-k \tag{7}$$

定理 1 定义如 (7) 的函数 F 是局部 Lipschitz 连续的。

由 B 样条的性质容易证得此结论, 证明省略。

定理 2 定义如 (7) 的函数 F 是半光滑的。

证明 对固定的 i , 记 $f_i(\lambda)=\left[\sum_{j=1}^N \lambda_j B_{j,k}(t)\right]_+ B_{i,k}(t), B_k(t)=(B_{1,k}(t), \cdots, B_{N,k}(t))^T$ 。经简单计算, 可得

$$\partial f_i(\lambda)=\begin{cases} \{B_{i,k}(t)B_k(t)\} & \sum_{j=1}^N \lambda_j B_{j,k}(t)>0 \\ \{\alpha B_{i,k}(t)B_k(t): \alpha \in [0,1]\} & \sum_{j=1}^N \lambda_j B_{j,k}(t)=0; \\ \{0\} & \text{其它} \end{cases}$$

由于 $B_{i,k}(t)$ 是分段多项式, 它们的乘积也是分段多项式。故由文献 [3] 的命题 3.1 可得

- (1) $f_i(\cdot)$ 在 $[a, b]$ 上一致 Lipschitz 连续;
- (2) 映射 $(t, \lambda) \rightarrow \partial f_i(\lambda)$ 是上半连续的;
- (3) 对任意固定的 $t \in [a, b], f_i(\cdot)$ 在任何 $\lambda \in \mathbf{R}^N$ 上是半光滑的。

由于 $F_i(\lambda)=\int_a^b f_i(\lambda)dt$, 由文献 [3] 的命题 3.1 以及上述结论, 可得 F_i 是半光滑的。由于向量函数半光滑当且仅当它的所有向量都是半光滑的^[7], 所以函数 F 是半光滑的。定理得证。

由函数 F_i 的半光滑性、文献 [5] 的引理 2.3、文献 [3] 的推论 4.3 和引理 4.4 以及文献 [7] 的命题 3.1, 容易得到下面关于算法收敛性的定理, 证明略。

定理 3 若 $\{\lambda^k\}$ 是由算法 1 在 $\epsilon=0$ 时生成的序列, 则此序列超线性收敛于方程 (3) 的解 λ^* 。

5 数值实验

我们用 MATLAB 实现算法 1。取 $k=3$, 终止判断条件 $\|F(\lambda^k)-d\| \leq 10^{-15}, \rho=0.5, \sigma=0.1, \delta=10^{-9}, \epsilon_k=\min\{\hat{q}, \|F(\lambda^k)-d\|\}$ 。计算得到的是所求样条函数的 k 阶导数截断多项式的系数, 要得到原函数 f 还需要对该截断多项式作 k 次不定积分。为讨论方便, 这里只考虑 $k=3$ 时的计算方法。

首先, $k=3$ 时求得的分段截断多项式每段的次数最高为 2, 可通过韦达定理求解每段的零点, 并考虑该段曲线的二次项系数 a 的符号。这里给出区间左端点处的判别准则, 对右端点可作类似的

处理:

- (1) 零点在区间外 (包括区间端点) 且 $a < 0$, 则不截断;
 - (2) 零点在区间外 (包括区间端点) 且 $a > 0$, 则从区间端点处截断;
 - (3) 零点在区间内且 $a > 0$, 则从零点处截断;
 - (4) 零点在区间内且 $a < 0$, 则从左端点至零点部分截断;
- 另外还要考虑重根和无根的情况:
- (5) 重根且 $a > 0$, 则不截断;
 - (6) 重根且 $a < 0$, 则从区间端点处截断;
 - (7) 无根且 $a > 0$, 则不截断;
 - (8) 无根且 $a < 0$, 则从区间端点处截断。

这样可获得新的节点序列 $k_i, i = 1, \cdots, m$ 。则共有 $(m - 1)$ 段次数不超过 2 的曲线, 统一记为 $a_i^2x + b_ix + c_i$, 由截断多项式 $(\sum_{i=1}^{n-k} \lambda_{i,k}(t)) +$ 容易求得 a_i, b_i, c_i , 对这 $(m - 1)$ 个二次多项式作不定积分 3 次, 得到 $s_i = \frac{1}{60}a_ix^5 + \frac{1}{24}b_ix^4 + \frac{1}{6}c_ix^3 + \frac{1}{2}dix^2 + ex + fi$ 。这些多项式又可分下列两种情况讨论:

- (1) 对于没有被截断的多项式, 可在区间中添加一个点 (文献 [8]), 加上两个区间端点共三个插值条件, 可求得三个未知系数;
- (2) 对于被截断的多项式, 如图 1 所示, 可将相邻三段多项式综合考虑。首先, 利用截断区间端点处的连续性条件, 有

$$\begin{aligned} s_{i-1}(k_i) &= s_i(k_i), s'_{i-1}(k_i) = s'_i(k_i), \\ s''_{i-1}(k_i) &= s''_i(k_i), s_i(k_{i+1}) = s_{i+1}(k_{i+1}), \\ s'_i(k_{i+1}) &= s'_{i+1}(k_{i+1}), s''_i(k_{i+1}) = s''_{i+1}(k_{i+1}) \end{aligned}$$

加上 s_{i-1} 和 s_{i+1} 各自一个插值条件, 同样的, 由于截断的缘故, 在新节点 k_i, k_{i+1} 之间的插值曲线为二次曲线, 因此, 在此区间中也添加一个点, 即再加一个插值条件, 则三段多项式 9 个未知系数共有 9 个条件可建立方程组求解, 这是个线性方程组, 求解比较容易, 这里就不再赘述了。上述情况 (2) 的特例就是被截断部分刚好在整个插值区间首尾两个子区间时, 如图 2、3 所示, 这时二段二次多项式共有 3 个插值和 3 个连续性条件, 同样可以求解。

例 1 $N = 5, k = 3, t = 0, 0.1, 0.4, 0.7, 0.8, 1, 1.2, 1.4;$
 $y = 1, 0.5, 0.3, 2.47, 3.77, 7.28, 12.35, 19.23$
表中符号意义如下: λ^0 为初始点; n 为插值点

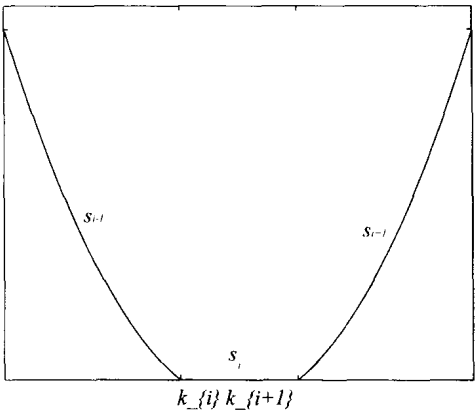


图 1 截断区间曲线

Fig. 1 The curve in the truncated interval

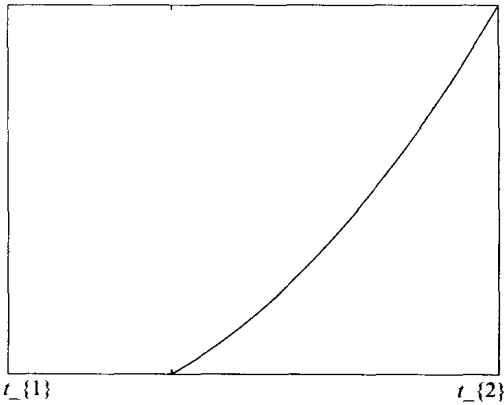


图 2 首端区间曲线

Fig. 2 The curve in the first interval

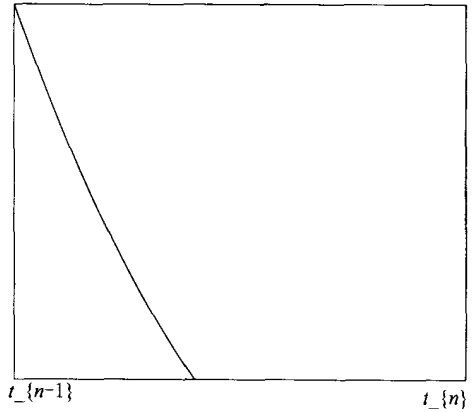


图 3 末端区间曲线

Fig. 3 The curve in the last interval

个数; It 为迭代次数; $\|F(\mathcal{X}) - d\|$ 为迭代停止时的误差; e 和 0 分别为 $\mathbf{R}^N$ 中的全 1 向量和全 0 向量。图 4 中实线是问题的解曲线, 点划线是普通的五次样条曲线, 小圆圈是插值点。

表 1 数值结果
Tab 1 Numerical results

λ^0	n	It	$\ F(\lambda^f) - d\ $
e	8	8	4.4409e-016
0	8	8	0
$-e$	8	10	9.9301e-016
$1000 * e$	8	9	2.2204e-016

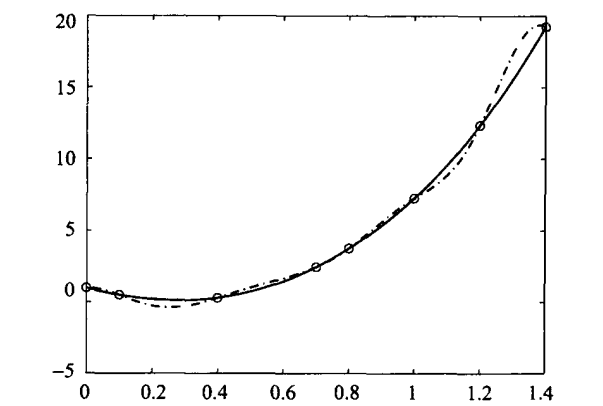


图 4 结果曲线
Fig 1 The resultant curve

6 结 论

例子显示算法简单有效，而且得出的解既有较高的连续性又克服了五次样条插值的振荡情况。

参考文献:

[1] LAURENT P J. Approximation et optimisation[M] . Paris: Hermann, 1972.

[2] 关履泰. 凸集样条函数的一种光顺样条迭代算法[J] . 高等学校计算数学学报, 1982, 3: 268— 279.

[3] DONTCHEV A L, QI H D, QI L Q. Convergence of Newton' s method for convex best interpolation[J] . Numer Math, 2001, 87: 435— 456.

[4] MICCHELLI C A, SMITH P W, SWETTITS J. Constrained L_p approximation[J] . Constr Approx, 1985, 1: 93— 102.

[5] IRVINE L D, MARIN S P, SMITH P W. Constrained interpolation and smoothing[J] . Constr Approx, 1986, 2: 129— 151.

[6] QI L Q. Convergence analysis of some algorithms for solving nonsmooth equations[J] . Math Oper Res, 1993, 18: 227— 244.

[7] QI L Q, SUN J. A nonsmooth version of Newton' s method [J] . Math Programming, 1993, 58: 353— 367.

[8] SCHUMAKER L. On shape preserving quadratic spline interpolation[J] . SIAM J Numer Anal, 1983, 20: 854— 864.

A Class of Best Interpolation Problems in a Convex Set
Solved by a Newton Algorithm

XIE Li ling, GUAN Lü tai

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

Abstract: Discuss the general best interpolation problem ($k \geq 3$) : minimize $\int_a^b |D^k y|^2 dt$, subject to $f(t_i) = y_i$, $i = 1, \cdots, n$; and $f^{(k)} > 0$. The problem is reduced to a system of semismooth equations, and a semismooth Newton algorithm is proposed to solve the system. The superlinear convergence of the proposed algorithm is shown. Then it is discussed how to compute the interpolant from its computed derivative $f^{(k)}(t)$. The numerical example illustrates the validity of these algorithms.

Key words: generalized Newton method; semismoothness; superlinear convergence; best convex interpolation