

解非线性规划的组合同伦 JFNG 法

王斌, 于波

(大连理工大学数学科学学院, 辽宁 大连 116023)

5 **摘要:** 同伦方法现已发展成为广泛应用于非线性规划中的重要算法之一, 然而随着问题规模地不断增加, 其数值算法效率亟待提高. 本文将 Jacobian-Free Newton-Gmres 方法引入组合同伦内点法中, 以此改进传统 Newton-PLU 方法在路径跟踪校正阶段所出现的“过解”等计算效率过低的弊端. CUTeR 中的测试算例表明改进后的组合同伦延拓法执行效率大幅提高.

10 **关键词:** 非线性规划; 组合同伦; 不精确牛顿法; JFNG

中图分类号: O221.2

Homotopy continuation method with JFNG for solving nonlinear programming

WANG Bin, YU Bo

(School of Mathematical Sciences, Dalian University of Technology, Liaoning DaLian 116023)

15 **Abstract:** Homotopy method has become widely used as one of the important algorithms for nonlinear programming. However, with the scale of the problems to be increasing, its algorithmic efficiency urgently needs to be improved. This paper brings Jacobian - Free Newton - Gmres method into the combined homotopy interior point method in order to improve some drawbacks of the low efficiency such as “excessively solving” caused by traditional Newton - PLU method in corrector stage of the path tracking process. The numerical examples from CUTeR demonstrate that the execution efficiency of the combined homotopy interior point method has been greatly improved.

20

25 **Keywords:** nonlinear programming; combined homotopy; inexact newton method; JFNG

0 引言

本文考虑同伦连续方法求解如下非线性规划问题 (NLP) :

$$\begin{aligned} \min & f(x) \\ \text{s.t.} & g_i(x) \leq 0, \quad i=1,2,\dots,m. \end{aligned} \quad (1)$$

30 其中, $x \in \mathbb{R}^n$, $f(x)$ 和 $g(x)$ 三次连续可微. 令 $\Omega = \{x \in \mathbb{R}^n | g(x) \leq 0\}$ 和 $\Omega^0 = \{x \in \mathbb{R}^n | g(x) < 0\}$ 分别为问题 (1) 的可行集和严格可行集, 边界 $\partial\Omega = \Omega \setminus \Omega^0$ 及 $\mathbb{R}_+^1 = \{y \in \mathbb{R}^1 | y \geq 0\}$, $\mathbb{R}_{++}^1 = \{y \in \mathbb{R}^1 | y > 0\}$, $B(x) = \{i | g_i(x) = 0, i \in \{1, 2, \dots, m\}\}$ 为 x 处的积极约束指标集.

上述问题(1)的 Karush-Kuhn-Tucker 条件为

$$\begin{aligned} \nabla f(x) + \nabla g(x)y &= 0 \\ Yg(x) &= 0 \\ g(x) &\leq 0 \\ y &\geq 0 \end{aligned} \quad (2)$$

35

其中, $Y = \text{diag}(y_i)$ 。

作者简介: 王斌, (1986-), 男, 硕士研究生, 研究方向为数值代数与最优化.

通信联系人: 于波, (1963-), 男, 教授, 数值代数、数值优化、计算金融. E-mail: yubo@dlut.edu.cn

同伦连续方法原本是论证非线性问题解存在的有效方法, 现已发展成为有效求解非线性规划问题的大范围收敛算法^[1]. 通过构造适当的同伦, 并经过数值追踪可以很好地获得非线性规划问题(1)的 KKT 点.

40 针对非凸非线性规划问题, 冯果忱、林正华、于波^[2,3]构造了一种组合同伦(Combined Homotopy Interior Point Method, 简称 CHIP 方法)加以求解, 并在可行集有界、边界正则且满足法锥条件的假设下, 证明了同伦路径的存在性和收敛性.

在数值追踪同伦路径的过程中, 校正阶段占据了算法绝大部分的计算量, 随着问题规模的不断增加, 传统 Newton-PLU 方法在校正过程所出现的“过解”和计算效率过低等弊端愈发明显, 如何快速有效地应用同伦方法成为亟待解决的课题.

45 JFNK (*Jacobian-Free Newton-Krylov*)方法作为一种特殊的非精确牛顿法, 由 Peter N. Brown 和 Youcef Saad 于 1990^[4]年首次提出, 现已发展成为专门求解大型稀疏非线性方程组的一类高效算法. 它是由非精确 Newton 迭代法^[5,6,7]和 Krylov 子空间迭代法^[8]嵌套而成, 并为求解非线性方程组提供了有效的途径.

50 该方法有两个显著优点: 一是运用 Krylov 子空间迭代法对 Newton 方程只需进行非精确求解, 减少计算量, 提高计算速度; 二是 Krylov 子空间方法的迭代过程只需用到 Jacobian 矩阵与向量的乘积, 而此乘积可通过向量函数的差分来近似, 因而无需形成和存储 Jacobian 矩阵, 可大大节省存储容量, 提高计算效率. 此后, 很多学者针对这一方法做了大量的基础性研究, Brown 等^[9]在文献[10]的基础上给出了 JFNK 方法的收敛理论. D. A. Knoll 和 D. E. Keyes 于 2004 年从实际应用的角度给出 JFNK 方法的评论性文章^[11]. 当前, 对 JFNK 方法的研究和应用仍十分广泛.

55 本文选取 Krylov 子空间方法中适于求解大型、稀疏非对称问题的 GMRES 方法^[12], 形成 JFNG 方法. 且以上述组合同伦内点法(CHIP)为例, 将 Jacobian-Free Newton-Gmres 方法应用于占据数值同伦延拓方法主要计算量的校正步, 给出了基于 JFNG 方法的组合同伦数值延拓算法, 并与传统 Newton-PLU 方法在 CUTer-Matlab 测试环境中进行了对比实验, 数值结果表明改进后算法效率得到了大幅提升.

1 组合同伦内点法

下面简要介绍组合同伦方法, 首先给出其所需满足的条件.

假设 1.1 Ω^0 非空 (Slater's 条件) 有界;

65 假设 1.2 (边界正则性条件) 对 $\forall x \in \partial\Omega$, $\{\nabla g_i(x^*) | i \in B(x)\}$ 正独立, 即

$$\sum_{i \in B(x)} \lambda_i \nabla g_i(x) = 0, \lambda_i \geq 0 \Rightarrow \lambda_i = 0$$

假设 1.3 (法锥条件) 对 $\forall x \in \partial\Omega$, Ω 在 x 处的法锥与 Ω 仅交于 x 点, 即对 $\forall x \in \partial\Omega$,

$$\left\{ x + \sum_{i \in B(x)} \nabla g_i(x) \lambda_i \mid \lambda_i \geq 0, i \in B(x) \right\} \cap \Omega^0 = \emptyset$$

70 定理 2.1[2,3] 基于 NLP(1)的 KKT 系统(2), 并满足上述假设条件 1.1-1.3, 构造组合同伦方程如下

$$H(x, y, t) = \begin{pmatrix} (1-t)(\nabla f(x) + \nabla g(x)y) + t(x - x^0) \\ Yg(x) - tY^0g(x^0) \end{pmatrix} = 0, \quad (3)$$

其中, $x^0 \in \Omega^0$, $y^0 \in \mathbb{R}_{++}^m$, $Y = \text{diag}(y)$, $Y^0 = \text{diag}(y^0)$.

则对几乎所有的 $x \in \Omega^0$ 和 $y^0 \in \mathbb{R}_{++}^m$, 0 是 $H(x, y, t)$ 的正则值, 且集合

$$H^{-1}(0) = \{(x, y, t) \in \Omega \times \mathbb{R}_{++}^m \times (0, 1] \mid H(x, y, t) = 0\}$$

75 包含一条始于 $(x^0, y^0, 1)$, 趋于超平面 $t = 0$ 的光滑曲线 Γ ; 设 $(x^*, y^*, 0)$ 为 Γ 的极限点, 则分量 x^* 是问题(1)的 KKT 点.

下面给出基于组合同伦方程(3)的路径追踪算法.

算法 1.1 组合同伦延拓法

Step 0 给定初始点 $x^0 \in \Omega^0$, $y^0 = 1$, $t_0 = 1$, 初始步长 $h_0 \in [h_{\min}, h_{\max}]$; 步长调节因子
80 $a \in (0, 1)$, 扩展参数 $M \geq 1$; 连续步预估夹角限定值 α_{\max} 与 α_{\min} ; 求解线性方程组次数统计量 N_s ; 每次校正步迭代上限 N_m 和实际次数 N_r 及终止容差 ε_1 ; 终极策略阈值 t_e , 校正步迭代上限 N_e 及其终止容差 ε_2 ; 跟踪路径长度 L , 预估校正迭代步数 $k = 1$.

Step 1 首次预估

初始预估方向向量 p^k 可通过求解以下方程组获得,

$$85 \begin{pmatrix} DH(x^k, y^k, t_k) \\ (p^0)^T \end{pmatrix} p^k = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

其中 $p^0 = (0, \dots, 0, -1)^T \in \mathbb{R}^{n+m+1}$, 然后不断调整步长 $h_k = a^j h_{k-1}$, $j = 0, 1, 2, \dots$, 计算预估点

$$(x^{k+1}, y^{k+1}, t_{k+1})^T = (x^k, y^k, t_k)^T + h_k \frac{(p^k)^T}{\|p^k\|} \in \Omega^0 \times (0, 1), \quad L = h_k, \quad \text{转 Step 3.}$$

Step 2 (割线) 预估步

如果校正步成功, 计算割线预估向量 $(p^k)^T = (x^k, y^k, t_k)^T - (x^{k-1}, y^{k-1}, t_{k-1})^T$ 及相邻两预估向

90 量夹角 $\alpha_k = \arccos \left(\frac{(p^k)^T p^{k-1}}{\|p^k\| \cdot \|p^{k-1}\|} \right)$; 不断调整步长 $h_k = a^j h_{k-1}$, $j = 0, 1, 2, \dots$, 使得新预估点

$$(x^{k+1}, y^{k+1}, t_{k+1})^T = (x^k, y^k, t_k)^T + h_k \frac{(p^k)^T}{\|p^k\|} \in \Omega^0 \times (0, 1), \quad \text{并累加路径长度 } L = L + h_k.$$

Step 3 校正步

令 $j = 0$, $(x^{k,j}, y^{k,j}, t_{k,j})^T = (x^k, y^k, t_k)^T$,

For $j = 1$ to N_m

95 如果 $\|H(x^{k,j}, y^{k,j}, t_{k,j})\| \leq \varepsilon_1$, 说明校正成功返回本次校正步迭代次数 $N_r = j$, 更新

$(x^{k+1}, y^{k+1}, t_{k+1})^T = (x^{k,j}, y^{k,j}, t_{k,j})^T$, 并令 $k = k + 1$;

否则在垂直于预估向量 $p^{(k)}$ 的超平面上采用牛顿迭代法校正:

$$\begin{pmatrix} DH(x^{k,j}, y^{k,j}, t_{k,j}) \\ (p^k)^T \end{pmatrix} s^j = - \begin{pmatrix} H(x^{k,j}, y^{k,j}, t_{k,j}) \\ 0 \end{pmatrix};$$

如果 $\|H(x^{k,1}, y^{k,1}, t_{k,1})\| > \|H(x^{(k)}, y^{(k)}, t_k)\|$, 说明本次校正失败并返回 $N_r = j$;

100 否则, 不断地调整参数 $\beta_j = a^j$, $j = 0, 1, 2, \dots$, 直到使

$$(x^{k,j+1}, y^{k,j+1}, t_{k,j+1})^T = (x^{k,j}, y^{k,j}, t_{k,j})^T + \beta_j (s^j)^T \in \Omega^0 \times (0, 1).$$

End

校正过程已达到预定允许次数, 但未收敛; 宣告失败并返回校正次数 $N_r = N_m$, 并统计线性方程组求解次数 $N_s = N_s + N_r$.

105 **Step 4 步长调整**

如果 $t_k < t_e$, 则转至 **Step 5**;

如果校正步成功, a) 校正成功连续 M 次及以上, 扩展步长 $h_k = \min\{h_{k-1}/a, h_{\max}\}$; b) 根据校正步数调整步长: 如果 $N_r \leq \frac{1}{3}N_m$, 扩展步长 $h_k = \min\{h_{k-1}/a, h_{\max}\}$, 如果 $N_r \geq \frac{2}{3}N_m$, 缩减步长 $h_k = ah_{k-1}$; c) 根据相邻预估向量夹角调整步长: 如果 $\alpha_k \leq \alpha_{\min}$, 扩展步长

110 $h_k = \min\{h_{k-1}/a, h_{\max}\}$, 如果 $\alpha_k \geq \alpha_{\max}$, 缩减步长 $h_k = ah_{k-1}$.

如果校正步失败, a) 缩减步长 $h_k = ah_k$, 如果 $N_r = 1$, 再次缩减步长 $h_k = ah_k$;

如果步长 $h_k < h_{\min}$, 表明跟踪失败, 放弃路径跟踪; 否则继续预估校正, 转 **Step 2**.

Step 5 终极策略步为保证高精度的迭代结果, 当跟踪到路径末端 $t_k < t_e$ 以后, 可认为此时 $(x_k, y_k)^T$ 已近似为原问题 **KKT** 系统的近似最优解, 可直接进行不包含参数 t 的校正迭代.

115 令 $j = 0$, $(x^{k,j}, y^{k,j})^T = (x^k, y^k)^T$,

For $j = 1$ to N_e

如果 $\|F(x^{k,j}, y^{k,j})\| \leq \varepsilon_2$, 说明校正成功返回本次校正步迭代次数 $N_r = j$, 返回最优解

$(x^*, y^*)^T = (x^{k,j}, y^{k,j})^T$, 算法成功终止;

120 否则继续采用牛顿迭代法进行校正:

$$DF(x^{k,j}, y^{k,j})s^{(j)} = -F(x^{k,j}, y^{k,j});$$

如果 $\|F(x^{k,1}, y^{k,1})\| > \|F(x^{(k)}, y^{(k)})\|$, 说明终极策略步校正失败;

否则, 不断地调整参数 $\beta_j = a^j$, $j = 0, 1, 2, \dots$, 直到使

$$(x^{k,j+1}, y^{k,j+1})^T = (x^{k,j}, y^{k,j})^T + \beta_j s^{(j)T} \in \Omega^0.$$

125 End

校正过程已达到预定允许次数, 但未收敛; 宣告终极策略步校正失败并统计线性方程组求解次数 $N_s = N_s + j$, 输出当前解 $(x^{k,j}, y^{k,j})^T$.

2 Jacobian-Free Newton-Gmres 方法

130 从上述组合同伦内点算法可见, 在路径跟踪的过程中, 主要计算量集中在校正步(包含终极策略), 也即每次校正需要求解如下非线性方程组

$$F(x) = 0. \quad (4)$$

其中, $F: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ 为连续可微函数.

2.1 PLU 分解

传统方法采用经典 Newton 迭代格式

$$135 \quad F'(x_k)s_k = -F(x_k), \quad x_{k+1} = x_k + s_k.$$

进行校正, 其优点为局部二次收敛; 但每次精确求解上述方程组的计算量庞大, 耗时显著, 换句话说, Newton 校正过程中过分追求精度反而降低了整个路径跟踪算法的效率.

对于每个牛顿步, 以往通常采用直接法—LU 分解, 令 $A_{n \times n} = F'(x_k)$, $b_{n \times 1} = -F(x_k)$, 则为求解 $A_{n \times n}x_{n \times 1} = b_{n \times 1}$, 首先对矩阵 $A_{n \times n}$ 进行 PLU 分解, 再分别进行前代法和回代法求解即可.

140 **算法 2.1** PLU 分解^[13] (部分选主元 Gauss 消元法)

置换向量 $p = 1, 2, \dots, n$.

For $k = 1, 2, \dots, n-1$

选取 $i \geq k$, 使得 $|a_{ik}|$ 最大化, 并进行如下交换

$$a_{i,:} \leftrightarrow a_{k,:}, \quad p_i \leftrightarrow p_k.$$

$$145 \quad a_{k+1:n,k} = a_{k+1:n,k} / a_{k,k}$$

$$a_{k+1:n,k+1:n} = a_{k+1:n,k+1:n} - a_{k+1:n,k} \cdot a_{k,k+1:n} \text{ (秩 1 外积更新)}$$

End

上述高斯消元法的浮点运算量为 $\frac{2}{3}n^3$ 次 flop, 前代法和回代法各需 n^2 次 flop.

2.2 不精确牛顿法

150 为减少 Newton 法的计算量, Dembo、Eisenstat 和 Steihaug 提出的非精确 Newton 法^[5] 在每次迭代中只需要近似求解线性方程组, 引入残差 r_k , 记为

$$r_k \equiv F'(x_k)s_k + F(x_k)$$

不精确牛顿法的迭代格式

$$F'(x_k)d_k = -F(x_k) + r_k, \quad x_{k+1} = x_k + s_k, \quad (5)$$

155 其中 $0 \leq \frac{\|r_k\|}{\|F(x_k)\|} \leq \eta_k < 1$, η_k 称为强迫序列.

定理 2.1^[6] 在满足如下假设条件下

i 存在 $x^* \in R^n$ 为方程(4)的解;

ii $F': \Omega \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}$ Lipschitz 连续, 即存在 γ , 使对 $\forall x, y \in \Omega$, 有

$$\|F'(x) - F'(y)\| \leq \|x - y\|;$$

160 iii $F'(x^*)$ 非奇异;

存在 δ 和 $\bar{\eta}$, 使得若 $x_0 \in B(\delta)$, $\{\eta_n\} \subset [0, \bar{\eta}]$, 则不精确牛顿迭代(5)所产生的迭代序列 $\{x^k\}$ q 阶线性收敛到 x^* , 而且有

当 $\eta_n \rightarrow 0$ 时, $\{x^n\}$ q 阶超线性收敛,

如果存在 $K_\eta > 0$, 有 $\eta_n \leq K_\eta \|F(x^n)\|^p$, 在 $\{x^n\}$ q 阶 $1+p$ 次超线性收敛.

165 **算法 2.2** 不精确牛顿法^[14]

Step 1 给定 $x_0 \in R^n$.

Step 2 For $k = 0, 1, 2, \dots$

选取 $\eta_k \in [0, 1)$ ，非精确求解 Newton 方程，使满足

$$\|F(x_k) + F'(x_k)s_k\| \leq \eta_k \|F(x_k)\| \quad (6)$$

170 令 $x_{k+1} = x_k + s_k$.

上述算法中， η_k 称为强迫序列， s_k 为非精确 Newton 步，(6)称为非精确 Newton 条件. 强迫序列 η_k 控制着求解 Newton 方程的相对误差精度，它的选取优劣对非精确 Newton 法的收敛性、效率以及鲁棒性有严重影响. 本文中强迫序列的选择采用 Eisenstat-Walker 策略^[6]，其总体思想如下，当迭代点 x_k 远离 x^* 时，求解 Newton 方程获得足够精度即可；当迭代点 x_k 靠近 x^* 时，我们希望获得二次收敛性，为此，一种基于相邻连续残差大小比值的方法如下：

$$\eta_k^{\text{Res}} = \gamma \|F(x_k)\|^2 / \|F(x_{k-1})\|^2,$$

其中 $\gamma \in (0, 1]$ ，假定 η_0 选择的较好，如果在整个迭代中 $\eta_k^{\text{Res}} \ll 1$ ，则 $\eta_k = \eta_k^{\text{Res}}$ 即可；为保证 η_k 远离 1，我们添加上限 η_{\max} ；同时，在迭代初始，我们没有必要把 η_k 设置的很小，这样会过分求解 Newton 方程，反而降低了整体求解效率，针对如此，[6,7]给出了防护措施 (Safeguarding)，其思想是如果 η_{k-1} 很大，那么 η_k 不能被调整地太小，

$$\eta_k = \min\left(\eta_{\max}, \max\left(\eta_k^{\text{Safe}}, 0.5\tau_r / \|F(x_k)\|\right)\right).$$

$\tau_r = \tau_a + \tau_r \|F(x_0)\|$ 为非线性迭代终止误差，它所起作用为防止迭代后期“过解”，综上有

$$\eta_k^{\text{Safe}} = \begin{cases} \eta_{\max} & k = 0 \\ \min(\eta_{\max}, \eta_k^{\text{Res}}) & k > 0, \gamma\eta_{k-1}^2 \leq 0.1. \\ \min(\eta_{\max}, \max(\eta_k^{\text{Res}}, \gamma\eta_{k-1}^2)) & k > 0, \gamma\eta_{k-1}^2 > 0.1 \end{cases}$$

在本文数值实验部分，我们取 $\gamma = 0.6$ ， $\eta_{\max} = 0.8$.

185 2.3 GMRES 方法

在所有 Krylov 子空间方法中，GMRES 方法^[12]被认为是求解大型、稀疏非对称问题最有效的方法. 首先，我们简要描述 GMRES 方法，假设残差 $r^0 = -F(x^k) - F'(x^k)x^0$ 及 Krylov 子空间

$$\mathcal{K}_m(F'(x^k), r^0) = \text{span}\{r^0, F'(x^k)r^0, \dots, F'(x^k)^{m-1}r^0\},$$

190 取 $v^1 = r^0 / \beta$ ，这里 $\beta = \|r^0\|_2$ ，然后通过 Arnoldi 迭代，构筑 $\mathcal{K}_m(F'(x^k), r^0)$ 的一组标准正交基，记作 $V = [v^1, v^2, \dots, v^m]$ ， \tilde{H}_m 为相应地上 Hessenberg 矩阵， H_m 为 \tilde{H}_m 删除最后一列所得矩阵，则有

$$F'(x^k)V_m = V_m H_m + h_{m+1,m} v_{m+1} e_m^T = V_{m+1} \tilde{H}_m \text{ 及 } V_m^T F'(x^k)V_m = H_m.$$

此时对 $\forall x \in x^0 + \mathcal{K}_m(F'(x^k), r^0)$ ，有

$$195 \quad x = x^0 + V_m y, \text{ 其中 } y \in \mathbb{R}^m, \quad (7)$$

定义 $\psi(y) = \|r\|_2 = \|-F(x^k) - F'(x^k)x\|_2 = \|F(x^k) + F'(x^k)(x^0 + V_m y)\|_2$ ，则有

$$\begin{aligned} r &= -F(x^k) - F'(x^k)x = -F(x^k) - F'(x^k)(x^0 + V_m y) \\ &= r^0 - F'(x^k)V_m y = \beta v^1 - V_{m+1} \tilde{H}_m y = V_{m+1}(\beta e_1 - \tilde{H}_m y) \end{aligned}$$

所以,

$$\psi(y) = \|b - A(x^0 + V_m y)\|_2 = \|\beta e_1 - \tilde{H}_m y\|_2; \quad (8)$$

200 GMRES 的近似解是通过极小化 $\psi(y)$ 来获取的, 由(7)和(8)知,

$$x^m = x^0 + V_m y^m, \text{ 其中 } y^m = \arg \min_{y \in \mathbb{R}^m} \|\beta e_1 - \tilde{H}_m y\|_2.$$

下面给出求解算法 2.2 中非精确 Newton 条件(6)的 GMRES 算法^[14]:

算法 2.3 GMRES ($x^k, \eta_k, maxit$)

给定初始点 x^k 及强迫因子 η_k , 最大迭代次数 $maxit$;

205 **Step1** 选取 $s^{k,0}$ 令 $m = 0$; 计算 $r^{k,0} = -F(x^k) - F'(x^k)s^{k,0}$, $\beta_k = \|r^{k,0}\|_2$, $v^1 = r^{k,0}/\beta_k$,

$$g^0 = \beta_k(1, 0, \dots, 0)^T \in \mathbb{R}^{N+1};$$

Step2 While $\|r^{k,m}\|_2 > \eta_k F(x^k)$ 且 $m < maxit$

GMRES 迭代:

令 $m = m + 1$,

210 计算 $v^{m+1} = F'(x^k)v^m$,

For $j = 1, \dots, m$

$$h_{j,m} = (v^{m+1})^T v^j$$

$$v^{m+1} = v^{m+1} - h_{j,m} v^j$$

End

215 $h_{m+1,m} = \|v^{m+1}\|_2$,

If $h_{m+1,m} \neq 0$

$$v^{m+1} = v^{m+1}/h_{m+1,m}$$

End

定义上 Hessenberg 阵 $\tilde{H}_m = (h_{ij}) \in \mathbb{R}^{(m+1) \times m}$, $i = 1, \dots, j+1, j = 1, \dots, m$.

220 求解最小二乘问题 $\min_{y \in \mathbb{R}^m} \|\beta_k e_1 - \tilde{H}_m y\|_2$, 得 $y_m \in \mathbb{R}^m$;

$$\text{令 } \|r^{k,m}\|_2 = \|\beta_k e_1 - \tilde{H}_m y^m\|_2$$

Step3 定义 $V_m = [v_1, v_2, \dots, v_m] \in \mathbb{R}^{n \times m}$, 并计算 $s^{k,m} = s^{k,0} + V_m y^m$;

Step4 令 $s^{k,*} = s^{k,m}$.

上述 GMRES 算法中的 Step2-ii-a 步为修正的 Arnoldi 迭代构建 \mathcal{K}_m 的标准正交基, 另外一种计算标准正交基的方法是采用 Householder 正交化技术; 此方法虽比修正的 Arnoldi 方法稳定, 但是其计算量为 $4m^2n - 4m^3/3$ 次浮点运算, 而修正的 Arnoldi 方法的计算量约为 $2m^2n$ 次浮点运算, 所以 Householder 正交化技术代价更加高昂.

GMRES 算法在实施过程中需存储 \mathcal{K}_m 标准正交基 V_m , 也即, 每进行 m 次迭代需存储 m 个 n 阶向量; 从实际应用的角度出发, 当问题规模 n 很大的时候, 为减少存储量, 固定上述

230 GMRES 算法最大迭代次数为 $maxit$ ，若经过 $maxit$ 次迭代算法并未收敛，则以 $s^{k,0} = s^{k,maxit}$ 重启上述算法。

算法迭代过程中的矩阵向量乘积可通过单变量函数的差分来近似

$$F'(u)p \approx \frac{F(u+\epsilon p) - F(u)}{\epsilon}, \quad (9)$$

本文中，我们取 $\epsilon = \frac{\epsilon_{\text{machine}}^{1/2}}{n \|p\|_2} \sum_{i=1}^n (1 + |u_i|)$ 。

235 GMRES 算法的收敛理论表明，其收敛速度与系数矩阵特征值的密集程度密切相关，分布越集中，收敛速度越快。因此预处理的作用在于使矩阵特征值的分布集中在某个值附近，改善矩阵的性质，加快 GMRES 的计算速度。此处，我们引入在计算流体力学中广为应用的 LU-SGS 预处理方法^[15,16]，在具体实施 JFNK 算法时，LU-SGS 预处理不需要显式地形成 Jacobi 矩阵（见算法 2.3），此处为了推导方便，我们仍以显式矩阵进行描述。假定我们已计算出
240 第 k 次迭代近似解 $x^{(k)}$ ，定义 $b = F(x^{(k)})$ ， $A = F'(x^{(k)})$ ，其中 $F'(x^{(k)})$ 为 $F(x)$ 在 $x^{(k)}$ 处的 Jacobi 矩阵；现将矩阵 A 分裂为

$$A = L + D + U,$$

$$\text{其中, } A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}, D = \begin{pmatrix} a_{11} & & & \\ & a_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & a_{nn} \end{pmatrix},$$

$$L = \begin{pmatrix} 0 & & & \\ a_{21} & 0 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ a_{n1} & \cdots & a_{n,n-1} & 0 \end{pmatrix}, U = \begin{pmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & a_{n-1,n} \\ & & & 0 \end{pmatrix};$$

245 则关于矩阵 A 的 LU-SGS 预处理矩阵 M 定义为

$$M = (D+L)D^{-1}(D+U).$$

假定 $b = F(x)$ ， $d_i (1 \leq i \leq n)$ 为 Jacobi 矩阵 $F'(x)$ 的对角线元素。利用 SSOR 预条件，对任意的向量 $p = (p_1, p_2, \dots, p_n)^T$ ，经预处理后的向量 $q = (q_1, q_2, \dots, q_n)^T$ 如可表述如下：

$$q = M^{-1}p = (D+U)^{-1}D(D+L)^{-1}p.$$

250 **算法 2.4** LU-SGS 右预处理算法

Step1 给定 $\epsilon > 0$ ，令 $y = x$ ， $p_1 = p_1/d_1$ ， $y_1 = x_1 + \epsilon p_1$ ；

Step2 For $i = 2, \dots, n$

$$p_i = \left(p_i - \left(\frac{F_i(y) - b_i}{\epsilon} \right) \right) / d_i,$$

$$y_i = x_i + \epsilon p_i,$$

255 End

Step3 计算 $q = (q_i) = Dp = (d_i p_i)$ ， $i = 1, \dots, n$ ；

Step4 令 $y = x$ ， $q_n = q_n/d_n$ ， $y_n = x_n + \epsilon q_n$ ；

Step5 For $i = n-1, \dots, 1$

$$q_i = \left(q_i - \left(\frac{F_i(y) - b_i}{\epsilon} \right) \right) / d_i,$$

260

$$y_i = x_i + \varepsilon q_i,$$

End

从算法 2.4 中可以看出, LU-SGS 右预处理只需计算两次向量函数 F 的值, 以及计算和存储其 Jacobi 矩阵的对角线元素, 而不需要完全的 Jacobi 矩阵, 所涉及 Jacobi 矩阵与向量的乘积只需要用向量函数的差分(9)近似计算即可.

265 3 数值结果

本节中, 我们将 Newton-PLU 和 JFNG 方法分别嵌入组合同伦算法校正步, 并节选 CUTEr 库中的 6 个测试问题作对比实验, 算法中各参数设置如下: $h_{\min} = eps$, $h_{\max} = 10$; $a = 1/2$, $M = 4$; $N_m = 5$, $\varepsilon_1 = 10^{-6}$; $\alpha_{\min} = \pi/10$, $\alpha_{\max} = \pi/5$; $t_e = 10^{-6}$; $N_e = 20$, $\varepsilon_2 = 10^{-8}$.

270 测试平台 Linux: Ubuntu 8.04, Matlab2010a, CUTEr^[17] (包含与 Matlab 接口); 硬件配置: CPU: Intel(R) Core(TM)2 4400 2.00GHz 2.01GHz, 内存: 2.00GB.

下面节选 CUTEr 库中的 6 个测试问题的数值结果.

表 1 分别以 Newton-PLU 和 JFNG 作校正算法的组合同伦内点法数值结果比较
Tab.1 the numerical comparisons for CHIP with Newton-PLU and JFNG as the corrector respectively

| 测试问题 | 校正算法 | $f(x^*)$ | $g_{\max}(x^*)$ | 预估次数 | 校正次数 | 路径长度 | 执行时间 |
|------------------|-------|--------------|-----------------|------|------|----------|-----------|
| HAIFAM | PLU | -45.00035733 | -1.31356614e-08 | 102 | 325 | 412.2014 | 894.1476 |
| (QR2-AN-99-150) | GMRES | -45.00035619 | -2.29258035e-09 | 119 | 423 | 413.7524 | 7.1818 |
| KSIP | PLU | 0.57579823 | -3.83540494e-09 | 50 | 148 | 86.2368 | 8240.8834 |
| (QLR2-AN-20-501) | GMRES | 0.57579840 | -4.71933606e-09 | 76 | 295 | 86.7329 | 33.3095 |
| LUKVL3 | PLU | 11.57754164 | -1.22124533e-15 | 31 | 102 | 38.7861 | 471.8946 |
| (OOR2-AY-500-2) | GMRES | 11.57754164 | -1.22124533e-15 | 56 | 212 | 38.8324 | 3.7380 |
| SIPOW1 | PLU | -0.99999991 | -9.06346534e-08 | 38 | 111 | 12.0600 | 8.6667 |
| (LLR2-AN-2-100) | GMRES | -0.99999975 | -2.47464946e-07 | 52 | 179 | 12.0026 | 1.2197 |
| SIPOW1M | PLU | -0.99999976 | -2.44308463e-07 | 40 | 118 | 17.4981 | 106.0415 |
| (LLR2-AN-2-250) | GMRES | -0.99999976 | -2.43065394e-07 | 54 | 174 | 17.4903 | 4.4319 |
| SIPOW2 | PLU | -1.00007880 | -1.22396085e-07 | 72 | 188 | 179.7650 | 3060.6078 |
| (LLR2-AN-2-500) | GMRES | -1.00007887 | -6.02807139e-08 | 98 | 335 | 181.3420 | 35.9261 |

275 注: 表中问题结构为 $x \times x \times m \times n$, m 表示问题维数, n 代表约束个数, 具体分类表图及解释可参见[18].

从上表中可清晰地发现, 将 JFNG 方法嵌入组合同伦方法校正步之后, 由于 JFNG 方法在校正过程中每次迭代并没有精确求解校正方程组, 所以整体组合同伦内点法的预估和校正次数都相应增大, 但算法执行效率却明显提升. 例如, 尽管表中问题 4 维数较低($m + n = 102$), 280 可效率提高到了原来的 7 倍. 由于 GMRES 算法特别适合求解大型、稀疏非对称问题, 我们可以预见随着问题规模的增加, 内置 JFNG 方法的组合同伦算法与内置 PLU 分解方法的组合同伦算法相比, 其优势将更加地明显.

4 结论

285 本文以组合同伦内点法(CHIP)为例, 将 Jacobian-Free Newton-Gmres 方法应用于占据数值同伦连续方法主要计算量的校正步, 给出了基于 JFNG 方法的数值同伦方法, 并与传统 Newton-PLU 方法在 CUTEr-Matlab 测试环境中进行了对比实验, 数值结果表明改进后算法效率明显提升; 这种嵌入 JFNK 方法的同伦方法很值得推广至工程应用.

[参考文献] (References)

290 [1] Allgower E L, Georg K. Introduction to Numerical Continuation Methods [M]. SIAM, Philadelphia, 2003.

- [2] Feng G C, Lin Z H, Yu B. Existence of an interior pathway to a Karush-Kuhn-Tuckerpoint of a nonconvex programming problem [J]. *Nonlinear Anal.*, 1998, 32: 761~768.
- [3] Feng G C, Yu B. Combined homotopy interior point method for nonlinear programming problems [J]. *Advances in numerical mathematics; Proceedings of the Second Japan-China Seminar on Numerical Mathematics* (Tokyo, 1994), vol. 14 of *Lecture Notes Numer. Appl. Anal.*, Kinokuniya, Tokyo, 1995: 9~16.
- 295 [4] Brown P N, Saad Y. Hybrid Krylov methods for nonlinear systems of equations [J]. *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, 1990, 11: 450~481.
- [5] Dembo R S, Eisenstat S C, Steihaug T. Inexact Newton methods [J]. *SIAM J. Numer. Anal.*, 1982, 19: 400~408.
- 300 [6] Kelley C T. *Iterative Methods for Linear and Nonlinear Equations* [M]. SIAM, Philadelphia, 1995.
- [7] Kelley C T. *Solving Nonlinear Equations with Newton's Method* [M]. SIAM, Philadelphia, 2003.
- [8] Vander Vorst, H. A. *Iterative Krylov Methods for Large Linear Systems* [M]. Cambridge University Press, Cambridge, 2003.
- [9] Brown P N, Saad Y. Convergence theory of nonlinear Newton-Krylov algorithms [J]. *SIAM J. Optim.*, 1994, 4: 297~330.
- 305 [10] Brown P N. A local convergence theory for combined inexact-Newton/finite difference projection methods [J]. *SIAM J. Numer. Anal.*, 1987, 24: 407~444.
- [11] Knoll D A, Keyes D E. Jacobian-free Newton-Krylov methods: a survey of approaches and applications [J]. *Comput. Phys*, 2004, 193: 357~397.
- 310 [12] Saad Y, Schultz, M H. GMRES: a generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems [J]. *SIAM J. Sci. Comput.* 1986, 7: 856~869.
- [13] Trefethen, Lloyd, N., Bau III, David. *Numerical Linear Algebra* [M], SIAM, 1997.
- [14] Bellavia S, Morini B. A globally convergent Newton-GMRES subspace method for systems of nonlinear equations [J]. *SIAM J. Sci. Comput.*, 2001, 23: 940~960.
- 315 [15] Chen R F, Wang Z J. Fast block lower-upper symmetric Gauss Seidel scheme for arbitrary grids [J]. *AIAA J*, 2000, 38(12):2238~2245.
- [16] Sharov D, Nakahashi K. Reordering of 3-D Hybrid Unstructured Grids for Vectorized LU-SGS Navier-Stokes Computations [J]. *AIAA Paper*, 1997, 97:2102~2117.
- [17] <http://www.cuter.rl.ac.uk/>
- 320 [18] <http://www.cuter.rl.ac.uk/Problems/classification.shtml>