关于线搜索中二次插值法终止准则的实现*1)

陈 绮 珑
（山 东 大 学）

REALIZATION ON TERMINATION RULE OF QUADRATIC INTERPOLATION IN LINE SEARCH

Chen Qi-long
(*Shandong University*)

Abstract

In this paper the termination rule of quadratic interpolation and its realization in computation are discussed. A feasible computing programme is given.

本文讨论的线搜索是精确的线搜索. 它是在一条已知的线上寻找单变量函数极小点的方法，也就是解一维极小问题的方法[1].

现考虑一维极小化问题

$$\min f(x), \qquad x \in R^1. \tag{1}$$

二次插值法是线搜索中常用且有效的一种算法. 它是以二次插值多项式来逐次拟合$f(x)$，并以其极小点

$$x^{(1)}, x^{(2)}, \cdots, x^{(k)}, \cdots$$

作为 $f(x)$ 的极小点 x^* 的近似点，直至满足精度要求

$$|x^{(k)} - x^*| \leqslant \varepsilon \tag{2}$$

为止，其中 ε 为予先给定的精度要求.

在线搜索中，一般需要首先确定初始搜索区间. 由于本文是对二次插值法终止准则的实现作理论上的探讨，因而以下均假定目标函数 $f(x)$ 在搜索区间上是单峰函数[1].

设 $f(x)$ 为定义在 $[a,b]$ 上的一实函数，若存在一点 $x_0 \in (a,b)$，使得对于 $x_1 < x_2$ 有

$$f(x_1) > f(x_2), \qquad \text{当 } x_1, x_2 \in [a, x_0] \text{ 时},$$
$$f(x_1) < f(x_2), \qquad \text{当 } x_1, x_2 \in [x_0, b] \text{ 时}$$

* 1993 年 1 月 27 日收到.
1）国家自然科学基金资助项目.

成立,则称 $f(x)$ 为 $[a,b]$ 上的单峰函数.

二次插值法属于线搜索中的解析方法. 它不同于试探法,除了要求 $f(x)$ 是单峰函数外,还要求 $f(x)$ 具有一定程度的光滑性[1]. 在二次插值法中通常采用的是三点二次拟合.

已知搜索区间上的三个点: x_1、x_2 和 x_3 及相应的目标函数值 $f(x_1)$、$f(x_2)$ 和 $f(x_3)$, 且对于 $x_1 < x_2 < x_3$, 有

$$f(x_1) > f(x_2) < f(x_3). \tag{3}$$

因为 $f(x)$ 为单峰函数, 所以极小点 $x^* \in [x_1, x_3]$. 然后过上述三点作二次插值多项式 $\varphi(x)$ 来拟合 $f(x)$, 并以 $\varphi(x)$ 的极小点

$$\bar{x} = \frac{1}{2} \cdot \frac{(x_1^2 - x_2^2)f_3 + (x_2^2 - x_3^2)f_1 + (x_3^2 - x_1^2)f_2}{(x_1 - x_2)f_3 + (x_2 - x_3)f_1 + (x_3 - x_1)f_2} \tag{4}$$

作为 x^* 的新的近似点, 其中 $f_1 = f(x_1)$, $f_2 = f(x_2)$, $f_3 = f(x_3)$. 若 $\bar{x}$ 满足精度要求

$$|\bar{x} - x^*| \leqslant \varepsilon, \tag{5}$$

则停止计算,此时 $\bar{x}$ 即为所求;否则, 在 x_1, x_2, x_3 和 $\bar{x}$ 中来构造一组满足式(3)的有所改进的三个新点 x_1', x_2' 和 x_3'[3], 有 $x_3' - x_1' < x_3 - x_1$. 重复上述做法直至获得满足式(5)的 $\bar{x}$.

一、实现终止准则的方法

由于 x^* 为欲求之极小点,因而如何实现终止准则(5)是值得商讨的问题. 到目前为止国内已有一些终止计算的方案. 下面我来谈谈对这个问题的考虑和做法.

首先用下式

$$|\bar{x} - x_2| \leqslant \varepsilon \tag{6}$$

来判断. 若满足上式此时是否可终止计算? 请看下图:

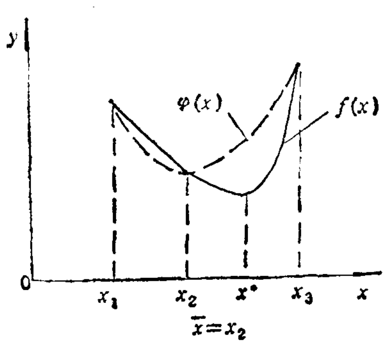


图 1

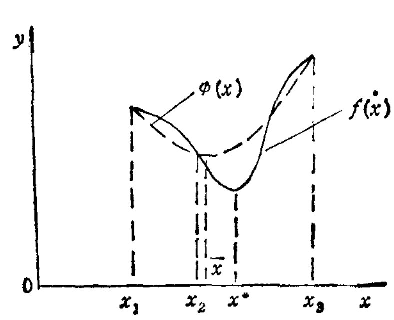


图 2

图 1 表明, 虽然 $|\bar{x} - x_2| = 0$, 且 $f(\bar{x}) = f(x_2)$, 但 $\bar{x}$ 并非所求. 图 2 表明, $|\bar{x} - x_2| \leqslant \varepsilon$ 且 $|f(\bar{x}) - f(x_2)| \leqslant \varepsilon$, 而 $\bar{x}$ 也不满足精度要求, 显然此时不能终止计算[2,3,5].

在满足式(6)的条件下，下面应分两种情形分别加以讨论，令 $\bar{f}=f(\bar{x})$.

1° 若 $\bar{f}<f_2$

① 当 $\bar{x}<x_2$ 时，取 $\hat{x}=\bar{x}-\varepsilon$，$\hat{f}=f(\hat{x})$，若 $\hat{f}\geqslant\bar{f}$，则停止计算，$\bar{x}$即为所求. 因为 $\bar{x}\in(\hat{x},\ x_2)$ 且 $|\bar{x}-x_2|\leqslant\varepsilon$，$|\bar{x}-\hat{x}|=\varepsilon$，又 $f(x)$ 为单峰函数，必有 $x^*\in[\hat{x},x_2]$，故 $|\bar{x}-x^*|\leqslant\varepsilon$ 成立；若 $\hat{f}<\bar{f}$，则取 $x_1'=x_1$，$x_2'=\hat{x}$，$x_3'=\bar{x}$ 继续进行迭代计算.

② 当 $\bar{x}>x_2$ 时，取 $\tilde{x}=\bar{x}+\varepsilon$，$\tilde{f}=f(\tilde{x})$，若 $\tilde{f}\geqslant\bar{f}$，则停止计算，$\bar{x}$ 即为所求. 同①因为此时必有 $x^*\in[x_2,\ \tilde{x}]$，故 $|\bar{x}-x^*|\leqslant\varepsilon$；若 $\tilde{f}<\bar{f}$，则取 $x_1'=\bar{x}$，$x_2'=\tilde{x}$，$x_3'=x_3$ 继续进行迭代计算.

由于 $\bar{f}>f_2$ 的情形不可能出现，因为 $\bar{x}$ 为当前 $\varphi(x)$ 的极小点，故不必考虑.

2° 若 $\bar{f}=f_2$

① 当 $\bar{x}\neq x_2$ 时，则终止计算，$\bar{x}$ 即为所求. 因为 $f(x)$ 为单峰函数，此时必有$x^*\in[\bar{x},x_2]$ 或 $x^*\in[x_2,\bar{x}]$，又因 $\bar{x}$ 满足(6)，故有 $|\bar{x}-x^*|\leqslant\varepsilon$ 成立.

② 当 $\bar{x}=x_2$ 时，取 $\hat{x}=\bar{x}-\varepsilon,\tilde{x}=\bar{x}+\varepsilon$，令 $\hat{f}=f(\hat{x}),\tilde{f}=f(\tilde{x})$. *a*) 若 $\hat{f}<\bar{f}$，则 $x^*\in[x_1,\bar{x}]$，于是取 $x_1'=x_1$，$x_2'=\hat{x}$，$x_3'=\bar{x}$ 继续迭代计算；*b*) 若 $\tilde{f}<\bar{f}$，则 $x^*\in[\bar{x},x_3]$，取 $x_1'=\bar{x}$，$x_2'=\tilde{x}$，$x_3'=x_3$ 继续迭代计算；*c*) 若 $\hat{f}\geqslant\bar{f}$ 且 $\tilde{f}\geqslant\bar{f}$，则停止计算，此时 $\bar{x}$ 即为所求. 因为 $f(x)$ 为单峰函数，此时必有 $x^*\in[\hat{x},\ \tilde{x}]$，故 $|\bar{x}-x^*|\leqslant\varepsilon$.

综上所述，在 $\bar{x}$ 满足式(6)后，有两种可能：一是获得满足精度要求的 $\bar{x}$，从而停止计算；另一是获得新的三点 x_1'，x_2' 和 x_3' 继续迭代计算直至获得真正满足终止准则(5)的 $\bar{x}$.

按上述方法进行，可避免以下两种状况：①若仅以 $|\bar{x}-x_2|\leqslant\varepsilon$ 为终止准则，则可能出现最终所得之 $\bar{x}$ 并不是满足精度要求的近似最优点，如图 1、2 所示. ②若以$|x_3-x_1|\leqslant\varepsilon$ 为终止准则，虽然所得之 $\bar{x}$ 确为所求，但有时可能会造成若干次不必要的迭代计算.

二、框　　图

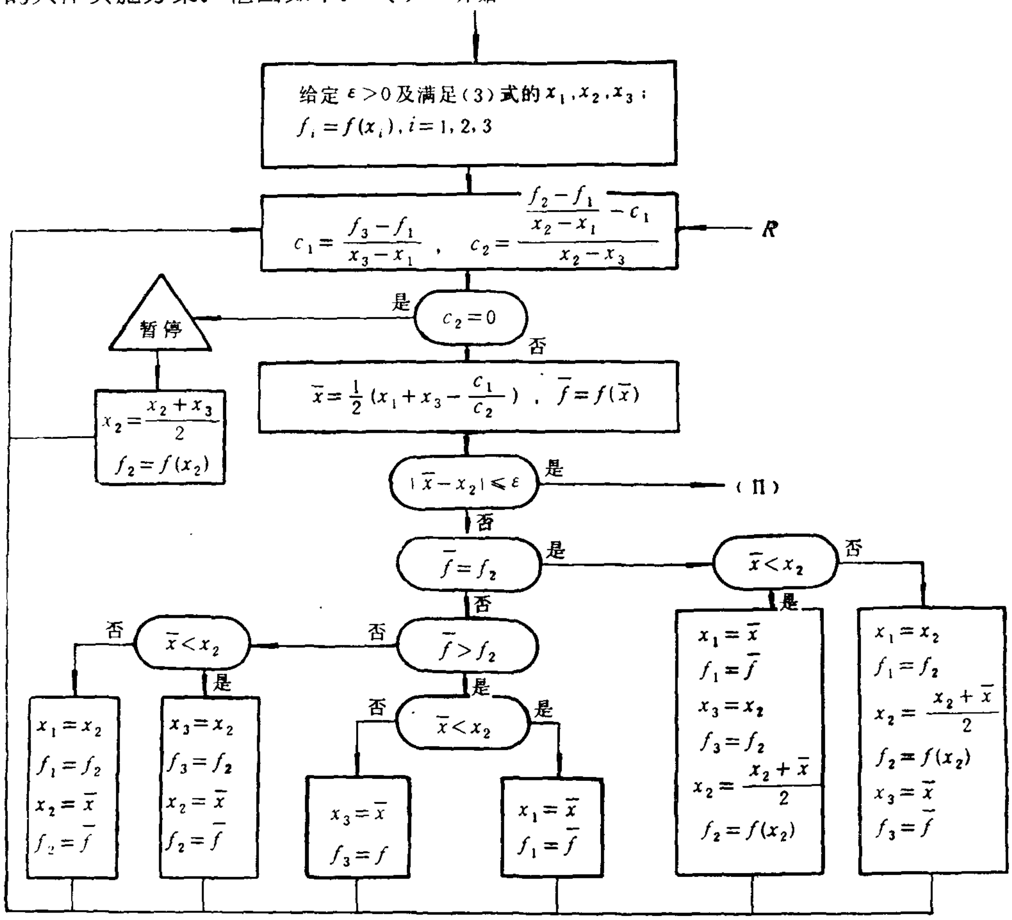
为提高计算精度和减少乘除法的运算次数，我们将采用下式[4]

$$
\begin{cases}
\bar{x}=\dfrac{1}{2}\left(x_1+x_3-\dfrac{c_1}{c_2}\right),\\[2ex]
c_1=\dfrac{f_3-f_1}{x_3-x_1},\\[2ex]
c_2=\dfrac{\dfrac{f_2-f_1}{x_2-x_1}-c_1}{x_2-x_3},
\end{cases}
$$

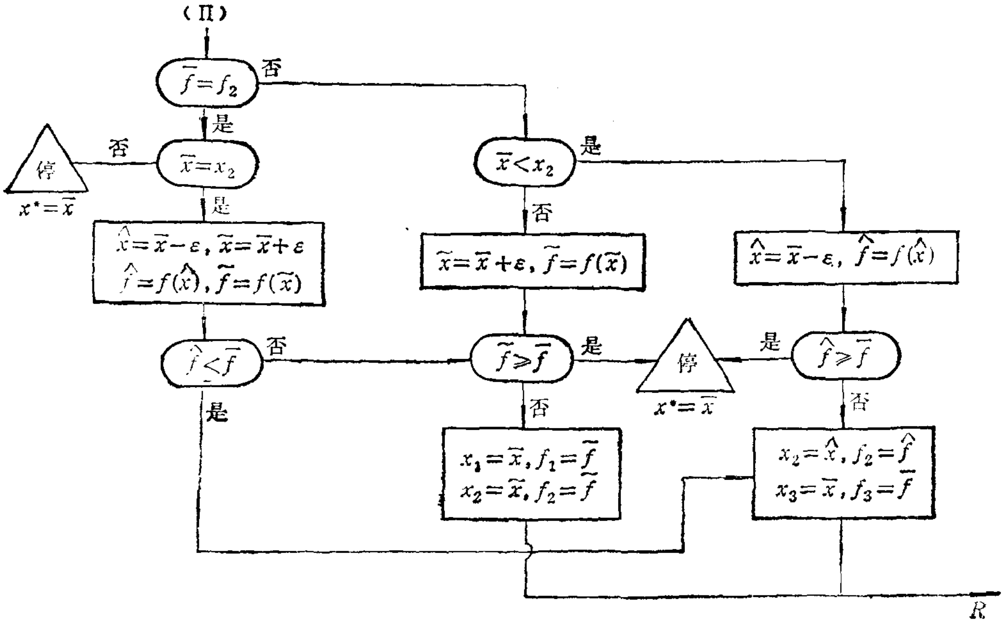
来替换式 (4).

框图共分两部分：第 (II) 部分为 $\bar{x}$ 满足(6)式后所采取的计算方案，即文章第一部

分的具体实施方案．框图如下： (I)



(II)



上述框图的第（II）部分是为判定是否终止计算的. 若 $\bar{x}$ 满足 $|\bar{x}-x^*|\leqslant\varepsilon$，则计算终止，$\bar{x}\doteq x^*$；否则继续迭代. 为判定当 $\bar{f}=f_2$ 时，需要计算两个点的函数值 $\hat{f}=f(\bar{x}-\varepsilon)$ 和 $\tilde{f}=f(\bar{x}+\varepsilon)$，而当 $\bar{f}\neq f_2$ 时只需计算一个点的函数值 $\hat{f}=f(\bar{x}-\varepsilon)$（或者 $\tilde{f}=f(\bar{x}+\varepsilon)$）. 框图(II)中 R 表示返回(I)中的相应位置.

事实上，若在这一部分有时允许多计算一个点的函数值，则可将框图(II)简化如下：

(II)

$\hat{x}=\bar{x}-\varepsilon,\ \hat{f}=f(\hat{x})$ → $\hat{f}<\bar{f}$？

是：$x_2=\hat{x},\ f_2=\hat{f}$；$x_3=\bar{x},\ f_3=\bar{f}$ → R

否：$\tilde{x}=\bar{x}+\varepsilon,\ \tilde{f}=f(\tilde{x})$ → $\tilde{f}<\bar{f}$？

- 是：$x_1=\bar{x},\ f_1=\bar{f}$；$x_2=\tilde{x},\ f_2=\tilde{f}$ → R
- 否：停，$x^*=\bar{x}$

三、数值试算结果

我们将分别用本文方法和以 $|\bar{x}-x_2|\leqslant\varepsilon$ 为终止准则的方法，对三个例题的计算结果作以比较. 例题中的目标函数在搜索区间内均为单峰函数.

例 1. [5]求解 $\min\limits_{0\leqslant x\leqslant 1} f(x)=x^3-x+1$

已知其极小点 $x^*=0.57735$，$f^*\doteq 0.615100$，取 $x_1=0$，$x_2=0.5$，$x_3=1$ 相应的函数值 $f_1=1$，$f_2=0.625$，$f_3=1$.

例 2. 求解 $\min\limits_{0\leqslant x\leqslant 3} f(x)=-\frac{1}{2}x^3+\frac{7}{2}x^2-7x+8$

已知其极小点 $x^*\doteq 1.45142$，$f^*\doteq 3.68443$，取 $x_1=0$，$x_2=2$，$x_3=3$，相应的函数值 $f_1=8$，$f_2=4$，$f_3=5$.

例 3. 求解 $\min\limits_{0\leqslant x\leqslant 2} f(x)=2x^4-9x^3+14x^2-8x+1.5$

已知其极小点 $x^*\doteq 0.466704$，$f^*\doteq -0.00425680$，取 $x_1=0$，$x_2=1.5$，$x_3=2$，相应的函数值 $f_1=1.5$，$f_2=0.75$，$f_3=1.5$（如图 3 所示）.

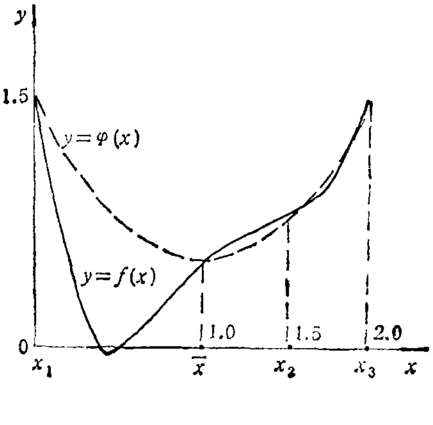


图 3

在编制程序计算时，应将框图（I）中的 $c_2=0$ 改为 $|c_2|<10^{-12}$ 或用其它小的

正数来控制,暂停可去掉。

现将计算结果列于表 1：

表 1

例题	终止准则						
	$\|\bar{x}-x_2\|\leqslant\varepsilon$			本文方法 ($\|\bar{x}-x^*\|\leqslant\varepsilon$)			
	n	$\bar{x}$	$\bar{f}$	n	$\bar{x}$	$\bar{f}$	获得此 $\bar{x}$ 前的 x_1, x_3 值
1	1	0.500000	0.625000	13	0.577350	0.615100	$x_1=0.577348$ $x_3=1$
2	1	2.00000	4.00000	21	1.45142	3.68443	$x_1=0$ $x_3=1.45142$
3	2	1.00000	0.500000	27	0.466704	−0.00425680	$x_1=0$ $x_3=0.466705$

注：① 其中 $\varepsilon=10^{-6}$，n 为迭代次数.

② 上述结果是用 Fortran 语言编制程序在微机 286 上计算获得的．为达到精度要求，对数据采用双精度,因为在极值点邻近函数值的变化大大小于变量 x 的变化．若精度要求不高则不必采用双精度.

从表中可知,采用 $|\bar{x}-x_2|\leqslant\varepsilon$ 为终止准则,对于上述三个例题均未能获得满足精度要求的近似极小点,而用本文方法均能达到。另外，由表中也可观察到用 $|x_3-x_1|\leqslant\varepsilon$ 来终止计算,若不采取扰动的方法,而采用其它方法,如令 $x_1'=x_1, x_2'=\bar{x}, x_3'=\frac{x_3+\bar{x}}{2}$ 等等继续迭代,则还需要进行若干次迭代方能终止计算。

参考文献

[1] D. G. 鲁恩伯杰，线性与非线性规划引论,科学出版社，1980，第 157,162 页.

[2] M. 阿佛里耳,非线性规划—分析与方法下册，上海科学技术出版社，1980，第 9 页.

[3] M. A. Wolfe, Numerical Methods for Unconstrained Optimization, VNR New York. Cincinnati. Toronto. London. Melboume, 1978, p. 63.

[4] 陈开周,最优化计算方法,西北电讯工程学院出版社，1985，第 51 页.

[5] 席少霖,非线性最优化方法,高等教育出版社,1992,第54页.