

優選法簡介(下)

國立台灣大學數學系 黃敏晃

六、效果估計

上面已經對優選法作了簡單的介紹，下面我們要進行比較理論性的探討。首先，對優選法的效果作一些定量的估計。

①均分法

如果把 0 到 1 之間的區間 $[0, 1]$ 分為 $n+1$ 等分，則有 n 個試驗點，其最優點必在 $\frac{2}{n+1}$ 長的區間內。假如我們要求的精度為 δ ，則必須

$$\text{使 } \frac{2}{n+1} < \delta$$

從上式可看出，實驗次數 n 的數量級是 $\frac{1}{\delta}$ 。對 k 個變數來說，其數量級是 $(\frac{1}{\delta})^k$ 。

②黃金分割法

使用黃金分割法，每次縮短試驗範圍 38.2%，也就是每次留下上次範圍的 0.618，所以 n 次試驗其最優點必然在一個長度為 $(0.618)^{n-1}$ 的區間內。如果我們要求的精度為 δ ，則必須使

$$(0.618)^{n-1} < \delta$$

$$\text{即 } n > 4.8 \log \frac{1}{\delta}$$

也就是說需要試驗的次數 n 的數量級是 $\log \frac{1}{\delta}$ 。

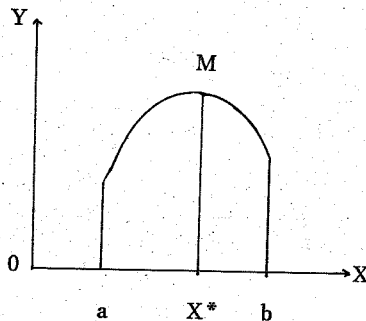
對 k 個變數來說 n 的數量級是 $(\log \frac{1}{\delta})^k$ 。

這裡必須提到，上面的效果估計只能作為參考。另外，理論上最精確的方法，並非在實際上最適用。重要的是按具體情況作具體分析。

七、為什麼最好點不會丟掉

在單因素優選法中，對比兩次試驗結果後都丟掉一段試驗範圍。試問，這樣做會不會把最好點丟掉呢？

在一定的條件下是不會的。拿煉合金鋼為例，假定某元素含量的選擇範圍是從 a 到 b ，記作 $[a, b]$ 。通常，隨着此元素含量的增加，強度會逐漸增大，到一定程度之後，強度又會逐漸減小。把含量 x 和強度 y 的對應關係用曲線表示，可得下圖中的曲線。最高點 M 所對應的含量 X^* ，就是所要找的最好點。



在數學上，我們習慣地把強度 y 稱為含量 x 的函數，記作 $y = f(x)$ ，上圖中的曲線叫做函

數 $y=f(x)$ 的圖形。

我們注意到，在上圖中 X^* 的左邊，隨着含量 x 的增加，強度 y 也增大，但在 X^* 的右邊，隨着含量 x 的增加，強度 y 却反而減小。具有這種性質的函數，叫做單峯函數。實際生產中呈現的規律，常屬於這種函數。如果我們所處理的是單峯函數，那麼最好點就不會丟掉。即

設 $y=f(x)$ 是 $[a, b]$ 上的單峯函數， x_1 和 x_2 ($x_1 < x_2$) 是 $[a, b]$ 上的兩個試驗點，又 $y_1=f(x_1)$ 和 $y_2=f(x_2)$ 依次是對應的試驗結果，則下列三種情況的處理都不會丟掉最高點 X^*

- (1) 若 $y_2 > y_1$ ，則丟掉 $[a, x_1]$ 。
- (2) 若 $y_2 < y_1$ ，則丟掉 $[x_2, b]$ 。
- (3) 若 $y_2 = y_1$ ，則丟掉 $[a, x_1]$ 和 $[x_2, b]$ 。

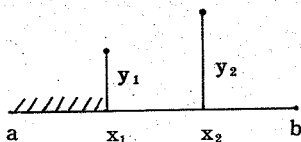
現在用反證法證明這個結論(參看下圖)：

在情況(1)中，假定最好點 X^* 屬於丟掉的範圍 $[a, x_1]$ 。那 x_1 與 x_2 都在 X^* 的右邊，即 $X^* < x_1 < x_2$

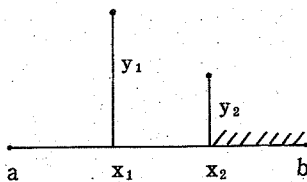
但根據單峯函數的性質，在 X^* 的右邊，隨着 x 的增加， y 應減小。這個結論與 $y_2 > y_1$ 矛盾。

情況(2)和(3)，可用同樣的方法證明

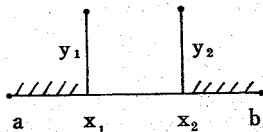
- (1) $y_2 > y_1$



- (2) $y_2 < y_1$



- (3) $y_2 = y_1$



八、 n 次試驗的最優方案

我們所碰到優選問題通常是這樣的：一種或多種因素影響一種效果。如何選擇諸因素適當的值，使效果最好。

用數學語言來說，效果是各因素的函數。這個函數通常稱為指標函數。因素的變化範圍，即優選範圍就是函數的定義域。優選問題歸結為找出使指標函數達到最大(或最小)值的點。

如果可以通過理論分析，找出指標函數的解析表達式，則指標函數的最大(或最小)值就可通過計算(微分)求得。如果指標函數的對應規律未被發現(通常都是如此)，只有通過逐步試驗求值的方式，去解決這個問題。所以最後問題變成，如何安排試驗，才能使得試驗次數最少，而效果最好呢？優選法就是要回答這個問題。

上面我們在單因素的情形看出，黃金分割法和分數法都比均分法要好的多。例如，用分數法做 10 次試驗，精度就可達到原範圍的 $\frac{1}{144}$ ，做 15 次試驗，精度可達到原範圍的 $\frac{1}{1597}$ 。用黃金分割法和分數法安排試驗為什麼好？是在那種意義下好？下面我們來加以討論。

①費氏數列和試驗的安排

在介紹單因素的優選法時，我們引進過下列的一串分數，這串分數趨近於黃金分割比的比值

$$\frac{\sqrt{5}-1}{2} \approx 0.618 :$$

$$\frac{1}{2}, \frac{2}{3}, \frac{3}{5}, \frac{5}{8}, \frac{8}{13}, \frac{13}{21}, \frac{21}{34}, \dots$$

這串分數的分子所組成的下列數列，叫做費鴻那齊數列。讓我們用 F_i 來表示此數列中的第 i 個數

1 2 3 5 8 13 21 34
 F_1 F_2 F_3 F_4 F_5 F_6 F_7 F_8 ,

不難看出，費氏數列的組成規則是如下的：

$$F_{n+1} = F_n + F_{n-1}, \quad n = 1, 2, 3, 4$$

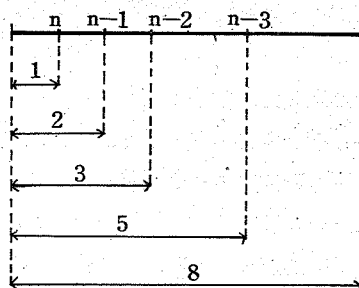
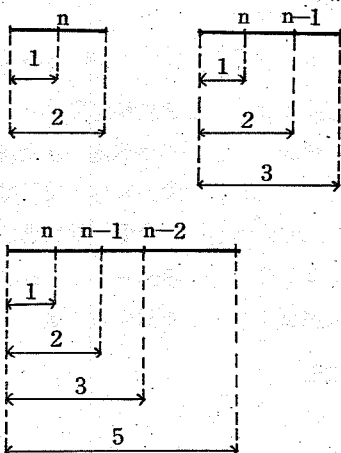
.....

爲了使上式在 $n=1$ 時有意義，規定 $F_0 = 1$ 。

在這裡，我們先解如何發現費氏數列來安排試驗的。目的是對費氏數列的提出給予一個直觀的說明。

我們從最後的第 n 個試驗出發，逆原來的試驗程序追溯到第一個試驗，就能容易地看出各次試驗間的關係。

最後的第 n 個試驗，其實試驗點處於其範圍的中點，所以其試驗範圍被其試驗點等分爲二等分。爲了敘述的確定和方便起見，不妨假定每次試驗之後都丟掉試驗範圍的右邊部分。如此，一個一個試驗追溯上去，就可得到下面幾個圖。這些圖中最上面的粗綫段，依次表示第 n 次，第 $n-1$ 次，第 $n-2$ 次，第 $n-3$ 次，.....的試驗範圍，而數字 n ， $n-1$ ， $n-2$ ， $n-3$ ，.....所標之處，則是各次試驗點所在的點，又各圖下方所標的數字，表示各次試驗範圍可分爲 n 等分（以最後第 n 次的試驗範圍爲 2 份計算）



這些圖中都保持下列的規律：把第 i 個試驗範圍對摺時，第 i 個試驗點一定和第 $i+1$ 個試驗點重合，即它們是各該試驗範圍的對稱點。

由這些分析可以看出，這些試驗範圍按 2 份，3 份，5 份，8 份..... F_{n+1} 份的規律還原爲原來的試驗範圍。這裡的 F_{n+1} 就是費氏數列中的第 $n+1$ 個數。

② n 次試驗所能達到的最高精度

讓我們再次回顧一次，當我們用分數法安排做 n 次試驗時，我們等於是在最初的試驗範圍中插入了 $F_{n+1} - 1$ 個分點，把該範圍分爲 F_{n+1} 等份。我們的試驗方案實質上是找出了這 $F_{n+1} - 1$ 個點上函數的最大值，而且這個方案是對任意的單峯函數而言都是適用的。換句話說，用分數法做 n 次試驗可以處理 $F_{n+1} - 1$ 個點。

一般說來，我們並不一定要要求插入於最初試驗範圍的 $F_{n+1} - 1$ 個點是均勻分佈的（即如分數法中那樣採取等分的方式）。我們可以在試驗範圍中任意插入 $F_{n+1} - 1$ 個點，仿照分數法的方式編排這些點的順序，並在 F_n 與 F_{n-1} 兩個分點作第一次和第二次試驗。比較這兩次試驗的結果後，丟掉一段試驗範圍，則剩下的試驗範圍就剛好有 $F_n - 1$ 個分點。把這些分點重新編排順序後，其第 F_{n-1} 與第 F_{n-2} 個分點中，有一個是做過試驗的點。在未做過試驗的點做一次試

驗，比較兩次試驗的結果後，丟掉一段試驗範圍。如此繼續下去，則對於任意的單峯函數而言， n 次試驗也能處理插入的 $F_{n+1}-1$ 個點。這個方法可以稱為廣義的分數法。

考慮任一個對所有單峯函數都適用的 n 次試驗方案 H ，設它所能處理的點數為 H_n 。令

$$K_n = S_{up} H_n$$

K_n 為所有 H_n 的上確界，即所有 n 次試驗方案中能處理最大點數，我們下面證明： $K_n = F_{n+1}-1$ 。

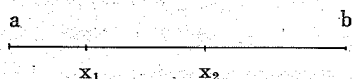
證明用數學歸納法進行。很顯然

$$\text{當 } n=1 \text{ 時, } K_1 = 1 = F_2 - 1$$

$$n=2 \text{ 時, } K_2 = 2 = F_3 - 1$$

當 $n \geq 3$ 時，按數學歸納法的假設， $K_i = F_{i+1}-1$ 對所有的 $i < n$ 成立，要由此證明 $K_n = F_{n+1}-1$ 。

設試驗範圍是區間 $[a, b]$ 。考慮一個對所有 $[a, b]$ 上的單峯函數都適用的 n 次方案 H ，它所能處理的插入點數是 H_n 個。設此方案的第一和第二個試驗點是 x_1 和 x_2 （為確定起見，不妨假定 $x_1 < x_2$ ），如下圖所示。



對這一取定的試驗方案 H ，現在分別來估計區間 (a, x_1) 與 (x_1, b) 中所含的插入點數 $\underline{H}(x_1)$ 與 $\overline{H}(x_1)$ 。

當我們把此方案 H 使用於單峯函數的最大值屬於區間 (x_1, b) 時，可以看到 (x_1, b) 不可能含有超過 K_{n-1} 個點，不然 $n-1$ 次試驗一定無法處理這麼多點（ K_{n-1} 的定義），即我們有

$$\overline{H}(x_1) \leq K_{n-1} = F_n - 1$$

又當我們把此方案 H 使用於單峯函數的最大值屬於區間 (a, x_1) 時，可以看到 (a, x_1) 不可能含有超過 K_{n-2} 個點（因為繪出最大值的點小於 x_1 ， x_2 點上的試驗做後，丟掉大於 x_2 的一段），不然 $n-2$ 次試驗無法處理這麼多點

，所以有

$$\underline{H}(x_1) \leq K_{n-2} = F_{n-1} - 1$$

把上面的兩個不等式結合起來，我們有

$$\begin{aligned} H_n &= \underline{H}(x_1) + \overline{H}(x_1) + 1 \\ &\leq (F_n - 1) + (F_{n-1} - 1) + 1 \\ &\leq F_{n+1} - 1 \end{aligned}$$

但上述的方案 H 是隨意取的，所以證明到此告一段落。即我們有 $K_n = S_{up} H_n = F_{n+1} - 1$ 。

最後，我們再來討論所謂試驗的精度這個問題。關於試驗的精度，根據實際的需要，可有各種不同的說法。最常見的第一種說法是：把經過試驗後留下的試驗範圍的大小作為試驗的精度；第二種說法是：把試驗得到的最好點，與試驗範圍中對於指標函數的最大值的點之間的距離作為精度。

相應於精度的不同說法，要得到最好的精度，插入的分點的分佈便有不同的規律。譬如說，進行兩次試驗時，我們最多只能比較二個分點上的函數值。設試驗範圍為 $[0, 1]$ ，相應於第一種的精度說，插入的分點可取為 $\frac{1}{2} - \epsilon$ 與 $\frac{1}{2} + \epsilon$ ，其中 $\epsilon > 0$ 是充分小的數。此時試驗的精度就是 $\frac{1}{2} + \epsilon$ 。當 $\epsilon \rightarrow 0$ 時，可知試驗的精度趨近於最佳值 $\frac{1}{2}$ 。

相應於第二種說法，則插入的點應均勻分佈，即取 $\frac{1}{3}$ 和 $\frac{2}{3}$ ，其試驗精度為 $\frac{1}{3}$ 。

對於第一種說法，我們不準備進一步討論。對於第二種說法，在 n 次試驗的情形，為了得到最佳精度，插入的分點應均勻分配。當我們把試驗區間 $[a, b]$ 作 F_{n+1} 等分時，作 n 次試驗能達到的最大精度（對單峯函數而言）是

$$\frac{b-a}{F_{n+1}}$$

□