第二章　实验设计

实验是解决水处理问题必不可少的一个重要手段，通过实验可以：

（1）找出影响实验结果的因素及各因素的主次关系，为水处理方法揭示内在规律，建立理论基础。

（2）寻找各因素的最佳量，以使水处理方法在最佳条件下实施，达到高效、省能，从而节省土建与运行费用。

（3）确定某些数学公式中的参数，建立经验式，以解决工程实际中的问题等。

在实验安排中，如果实验设计得好，次数不多，就能获得有用信息，通过实验数据的分析，可以掌握内在规律，得到满意结论；如果实验设计得不好，次数较多，也摸索不到其中的变化规律，得不到满意的结论。因此，如何合理地设计实验，实验后又如何对实验数据进行分析，以用较少的实验次数达到我们预期的目的，是值得研究的一个问题。

优化实验设计，就是一种在实验进行之前，根据实验中的不同问题，利用数学原理，科学地安排实验，以求迅速找到最佳方案的科学实验方法。它对于节省实验次数，节省原材料，较快得到有用信息是非常必要的。由于优化实验设计法为我们提供了科

学安排实验的方法，因此，近年来优化实验设计越来越被科研人员重视，并得到广泛的应用。优化实验设计打破了传统均分安排实验的方法，其中单因素的 0.618 法和分数法、多因素的正交实验设计法在国内外已广泛应用于科学实验，取得了很好的效果。本章将重点介绍这些内容。

第一节　实验设计的基本概念

1．实验方法

通过做实验获得大量的自变量与因变量一一对应的数据，以此为基础来分析整理并得到客观规律的方法，称为实验方法。

2．实验设计

实验设计是指为节省人力、财力，迅速找到最佳条件，揭示事物内在规律，根据实验中不同问题，在实验前利用数学原理科学编排实验的过程。

3．指　标

在实验设计中用来衡量实验效果好坏所采用的标准称为实验指标（或简称指标）。例如，天然水中存在大量胶体颗粒，使水浑浊，为了降低浑浊度，需往水中投放混凝剂药物，当实验目的是求最佳投药量时，水样中剩余浊度即可作为实验指标。

4．因　素

对实验指标有影响的条件称为因素。例如，在水中投入适量的混凝剂可降低水中的浊度，因此水中投加的混凝剂即可作为分析的实验因素。有一类因素，在实验中可以人为地加以调节和控制，如水质处理中的投药量，叫作可控因素；另一类因素，由于自然条件和设备等条件的限制，暂时还不能人为地调节，如水质处理中的气温，叫作不可控因素。在实验设计中，一般只考虑可控因素。因此，今后说到因素，凡没有特别说明的，都是指可控因素。

5．水　平

因素在实验中所处的不同状态，可能引起指标的变化，因素变化的各种状态叫作因素的水平。某个因素在实验中需要考察它的几种状态，就叫它是几水平的因素。

因素的各个水平有的能用数量来表示，有的不能用数量来表示。例如，有几种混凝剂可以降低水的浑浊度，现要研究哪种混凝剂较好，各种混凝剂就表示混凝剂这个因素的各个水平，不能用数量表示。凡是不能用数量表示水平的因素，叫作定性因素。在多因素实验中，经常会遇到定性因素。对定性因素，只要对每个水平规定具体含义，就可与通常的定量因素一样对待。

6．因素间交互作用

实验中所考察的各因素相互间没有影响，则称因素间没有交互作用，否则称为因素间有交互作用，并记为 A（因素）×B（因素）。

第二节　单因素优化实验设计

对于只有一个影响因素的实验，或影响因素虽多但在安排实验时，只考虑一个对指标影响最大的因素，其他因素尽量保持不变的实验，即为单因素实验。我们的任务是如何选择实验方案来安排实验，找出最优实验点，使实验的结果（指标）最好。

在安排单因素实验时，一般考虑三方面的内容：

（1）确定包括最优点的实验范围。设下限用 a 表示，上限用 b 表示，实验范围就用由 a 到 b 的线段表示，记作$[a，b]$。若 x 表示实验点，则写成 $a \le x \le b$，如果不考虑端点 a、b，就记成（a、b）或 $a < x < b$（图 2-1）。

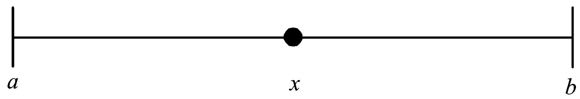

图 2-1　单因素实验范围

（2）确定指标。如果实验结果（y）和因素取值（x）的关系可写成数学表达式 $y = f(x)$，称 $f(x)$ 为指标函数（或称目标函数）。根据实际问题，在因素的最优点上，以指标函数 $f(x)$ 取最大值、最小值或满足某种规定的要求为评定指标。对于不能写成指标函数甚至实验结果不能定量表示的情况，例如，比较水库中水的气味，就要确定评定实验结果好坏的标准。

（3）确定实验方法，科学地安排实验点。本节主要介绍单因素优化实验设计方法。内容包括均分法、对分法、0.618 法和分数法。

一、均分法

均分法的做法如下：如果要做 n 次实验，就把实验范围等分成 $n+1$ 份，在各个分点上做实验。如图 2-2。

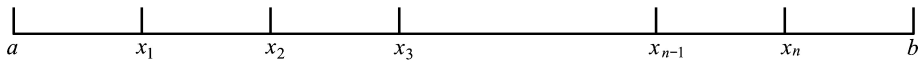

图 2-2　均分法实验点

实验点 x_i 的计算公式为

$$x_i = a + \frac{b-a}{n+1} i \tag{2-1}$$

把 n 次实验结果进行比较，选出所需要的最好结果，相对应的实验点即为 n 次实验中最优点。

均分法是一种古老的实验方法。优点是只需把实验放在等分点上，实验可以同时安排，也可以一个接一个地安排；其缺点是实验次数较多，代价较大。

二、对分法

对分法的要点是每次实验点取在实验范围中点。若实验范围为[a，b]，中点公式为

$$x = \frac{a+b}{2} \tag{2-2}$$

采用这种方法，每次可去掉实验范围的一半，直到取得满意的实验结果为止。但是用对分法是有条件的，它只适用于每做一次实验，根据结果就可确定下次实验

方向的情况。

如某种酸性污水，要求投加碱，调整 pH = 7 ~ 8，加碱量范围为[a，b]，试确定最佳投药量。若采用对分法，第一次加药量 $x_1 = \frac{a+b}{2}$，加药后水样 pH < 7（或 pH > 8），则加药范围中小于 x_1（或大于 x_1）的范围可舍弃，而取另一半重复实验，直到满意为止。

三、0.618 法

单因素优选法中，对分法的优点是每次实验可以将实验范围缩短一半；缺点是要求每次实验能确定下次实验的方向。有些实验不能满足这个要求，因此，对分法的应用受到一定限制。

科学实验中，有相当普遍的一类实验，目标函数只有一个峰值，在峰值的两侧实验效果都差，将这样的目标函数称为单峰函数（图 2-3）。

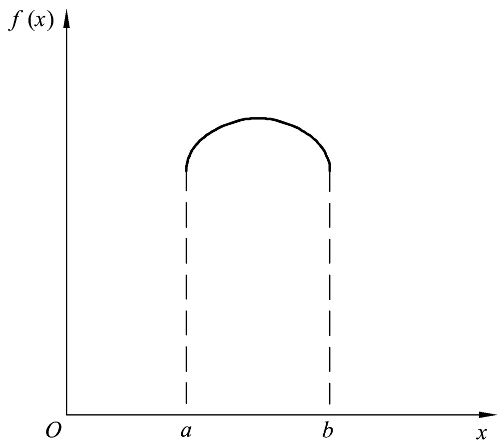

图 2-3　上单峰函数

0.618 法适用于目标函数为单峰函数的情形。其做法如下：

（1）确定实验范围（在一般情况下，通过预实验或其他先验信息，确定了实验范

围[a，b]；

（2）选实验点（这一点与前述均分、对分法的不同处在于它是按 0.618、0.382 的特殊位置定点的，一次可得出两个实验点 x_1，x_2 的实验结果）（图 2-4），即

$$x_1 = a + 0.618(b-a) \tag{2-3}$$

$$x_2 = a + 0.382(b-a) \tag{2-4}$$

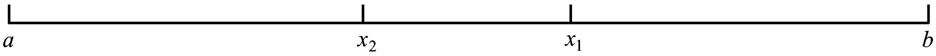

图 2-4　0.618 第 1、2 个试验点分布

（3）根据“留好去坏”的原则对实验结果进行比较，留下好点，从坏点处将实验范围去掉，从而缩小实验范围。设 $f(x_1)$ 和 $f(x_2)$ 表示 x_1、x_2 两点的实验结果，$f(x)$ 值越大，效果越好。分几种情况讨论。

① 若 $f(x_1) > f(x_2)$，即 $f(x_1)$ 比 $f(x_2)$ 好，则根据“留好去坏”的原则，去掉实验范围 $[a, x_2]$ 部分，在 $[x_2, b]$ 内继续实验。见图 2-5。

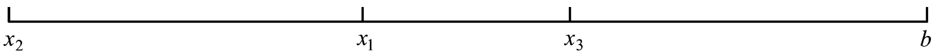

图 2-5　①时第 3 个实验点 x_3

若去掉实验范围的左边区间，则将新试验点排在新实验范围的 0.618 位置上，另一个试验点在新范围的 0.382 位置上，但这一点恰巧在旧区间已试的实验点上。

$$x_3 = x_2 + 0.618(b-x_2) \tag{2-5}$$

$$x_4 = x_2 + 0.382(b-x_2) \tag{2-6}$$

而 $\dfrac{|x_2x_1|}{|x_2b|}=\dfrac{0.236}{0.618}=0.382$ （已试）

所 以 $x_4=x_1$

即除第一次要取两个试验点外，以后每次只取一个试验点，另一个试验点在已试点上（不做）。

同理，比较两个结果，去坏留好，进一步缩小范围，进一步做实验，最后找出最佳点。

② 若 $f(x_2)>f(x_1)$，即 $f(x_2)$ 比 $f(x_1)$ 好，则根据“留好去坏”的原则，去掉实验范围的 $[x_1, b]$，在剩余范围 $[a, x_1]$ 内继续实验。见图 2-6。

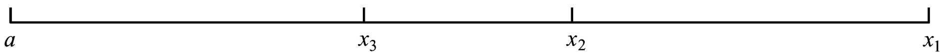

图 2-6 ②时第 3 个实验点 x_3

若去掉实验范围的右区间，则新点安排在新实验范围的 0.382 处，已试点一定在新区间的 0.618 处。

$$x_3=a+0.382(x_1-a) \text{（新实验点 } x_3\text{）} \tag{2-7}$$

③ 若 $f(x_1)$ 和 $f(x_2)$ 实验效果一样，去掉两端，在剩余范围 $[x_1, x_2]$ 内继续实验。两个新实验点：

$$x_3=x_2+0.618(x_1-x_2) \tag{2-8}$$

$$x_4=x_2+0.382(x_1-x_2) \tag{2-9}$$

④ 在新实验范围内按 0.618、0.382 的特殊位置再次安排实验点，重复上述过程，直至得到满意结果，找出最佳点。

四、分数法

1．分数法的概念

分数法又称菲波那契数列法，它是利用菲波那契数列进行单因素优化实验设计的一种方法。其基本思想和 0.618 法是一致的，主要不同点是：0.618 法每次都按同一比例常数 0.618 来缩短区间，而分数法每次都是按不同的比例来缩短区间的，它是按菲波那契数列产生的分数序列为比例来缩短区间的。

13 世纪，意大利人 Fibonacci 曾经考虑过这样一串数：

$$\begin{cases} F_0 = F_1 = 1 \\ F_{n+1} = F_n + F_{n-1},\ n \geqslant 2 \end{cases} \tag{2-10}$$

即从第 3 项起，每一项都是它前两项之和，称为 Fibonacci 数列 $\{F_n\}$。

这个整数序列写出来就是：1，1，2，3，5，8，13，21，34，...

2．利用分数法进行单因素优化实验设计

（1）所有可能进行的实验总次数 $m = F_n - 1$ 时，即 m 正好与菲波那契数列中某数减 1 相一致时。则前两个实验点分别放在 F_{n-1} 和 F_{n-2} 位置上。

例如，通过某种污泥的消化实验确定其较佳投配率 P，实验范围为 2% ~ 13%，以变化 1% 为一个实验点，则可能实验总次数为 12 次，符合 $12 = 13 - 1 = F_6 - 1$。即 $m = F_n - 1$

的关系，第一个实验点为 $F_{n-1}=F_5=8$。即放在第 8 个实验点处，如表 2-1 所示，投配率为 9%。

第二个实验点为 $F_{n-2}=F_4=5$，即第 5 个实验点，投配率为 6%。

实验后，比较两个不同投配率的结果，根据产气率、有机物的分解率，若污泥投配率 6% 优于 9%，根据“留好去坏”的原则，去掉 9% 以上的部分（反之，则去掉 6% 以下的部分），重新安排实验。

此时实验范围为 8 左侧的部分，可能实验次数 $m=7$ 符合 $8-1=7$， $m=F_n-1$， $F_n=8$，故 $n=5$。第 1 个实验点为 $F_{n-1}=F_4=5$， $P=6\%$

该点已实验，第 2 个实验点为 $F_{n-2}=F_3=3$， $P=4\%$（或利用在该实验范围内与已有实验点的对称关系找出第 2 个实验点，如在 1～7 之间与第 5 点对称的点为第 3 点，相对应的投配率 $P=4\%$）。比较投配率为 4% 和 6% 两个实验的结果，并按上述步骤重复进行，如此进行下去，则对可能的 $F_6-1=13-1=12$ 次实验，只要 $n-1=6-1=5$ 次实验，就能找出最优点。

表 2-1　分数法第一种情况安排实验

可能实验次序		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	
F_n 数列	F_0	F_1	F_2	F_3		F_4			F_5					F_6
相应投配率/%		2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	
实验次序			x_4	x_3	x_5	x_2			x_1					

（2）可能进行的实验总次数 m 符合下列关系式： $F_{n-1}-1<m<F_n-1$