

HUANJING SHIYAN
YOUHUA SHEJI
YU
SHUJU FENXI

环境试验优化设计 与 数据分析

张 晨 陈玉成 主编



化学工业出版社

HUANJING SHIYAN YOUHUA SHEJI YU SHUJU FENXI

环境试验优化设计 与数据分析

张 晟 陈玉成 主编



化学工业出版社

邮购电话：010-64518888 (转111)

本书较为系统地介绍了环境研究过程中的试验优化设计及其数据分析方法。除绪论外，第一章介绍环境研究中常用的优化试验设计方法，包括优选设计、正交设计、均匀设计；第二章和第三章分别从图表角度和效应角度介绍了环境试验数据结果的展示分析和比较分析；第四、第五、第六章则分别介绍了环境试验数据的关系分析，类别分析，序列分析；第七章、第八章分别介绍正交设计试验与均匀设计试验的数据分析；书末附有常用的正交设计表、均匀设计表和数据分析统计用表。

本书可供环境科学与工程等领域的科研人员、技术人员和管理人员参考，也可作为高等院校相关专业师生参阅。

图书在版编目 (CIP) 数据

环境试验优化设计与数据分析/张晨，陈玉成主编. —北京：
化学工业出版社，2008. 4

ISBN 978-7-122-02332-2

I. 环… II. ①张…②陈… III. ①环境试验-最优设计②环境
试验-试验数据-分析方法 IV. X-33

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2008) 第 033070 号

责任编辑：刘兴春

文字编辑：刘莉琪

责任校对：洪雅妹

装帧设计：史利平

出版发行：化学工业出版社（北京市东城区青年湖南街 13 号 邮政编码 100011）

印 刷：大厂聚鑫印刷有限责任公司

装 订：三河市延风装订厂

720mm×1000mm 1/16 印张 13 1/4 字数 257 千字 2008 年 5 月北京第 1 版第 1 次印刷

购书咨询：010-64518888（传真：010-64519686） 售后服务：010-64518899

网 址：<http://www.cip.com.cn>

凡购买本书，如有缺损质量问题，本社销售中心负责调换。

定 价：40.00 元

版权所有 违者必究

前言

环境是一个多因素、多变量的开放大系统。环境研究的基本过程不外乎发现环境问题、分析环境问题和解决环境问题，在这个过程中，如何通过试验获取环境基础数据，挖掘其中有用的环境信息，探索环境现象的产生、发展和变化过程，从而揭示环境问题的本质，是环境研究工作者常常面临的问题。在作者多年教学与科研经历中，常常听到研究生、研究人员诉说学位论文、学术论文深度不够，其主要原因之一便是数据分析常常停留于表观分析阶段，这些使作者萌发了编写本书的愿望。

另一方面，数据分析作为一种研究手段，已经渗透到自然科学、工程科学、管理科学的各个领域，形成了更多更新的交叉学科。随着现代科学技术的发展，数据分析的要求越来越高，应用范围也越来越广，很多传统的数据处理方法也很难解释和表述环境复杂系统的内部规律。与此同时，很多研究生乃至科研工作者，通常将大部分精力放在试验研究上，而忽略了数据发掘研究，等到需要时却苦于找不到相关的数据处理书籍，即使找到了，其理论程度也较深，难以应用，因此急需类似的数据分析图书，这是本书编写的第二个理由。

本书较为系统地介绍了环境研究过程中的试验优化设计及其数据分析方法。全书共分八章，除绪论外，第一章介绍环境研究中常用的优化试验设计方法，包括优选设计、正交设计、均匀设计；第二章从图表角度介绍环境试验数据结果的展示分析；第三章从效应角度介绍环境试验数据结果的比较分析；第四章介绍环境试验数据的关系分析，包括偏相关分析、复相关分析、典型相关分析、主成分分析和对应分析；第五章环境试验数据的类别分析，包括系统聚类分析、模糊聚类分析、判别分析；第六章介绍环境试验数据的序列分析，包括物元分析、投影寻踪分析、分形分维分析；第七章、第八章分别介绍正交设计试验与均匀设计试验的数据分析；书末附有常用的正交设计表、均匀设计表和数据分析统计用表。

本书作者由长期从事环境保护科研与教学方面的人员组成。具体分工为张晟（重庆市环境科学研究院）编写绪论、第二章、第三章、第四章，陈玉成（西南大学资源环境学院）编写第一章、第六章，杨志敏（西南大学资源环境学院）编写第五章、第七章，陈庆华（西南大学资源环境学院）编写第八章和附录。全书由张晟、

陈玉成统稿。

本书对环境研究过程中的试验设计与数据分析方法进行了较为系统的归纳与总结，为该领域研究提供了新的思路，可作为环境领域广大科研人员、技术人员和管理人员处理实际环境问题的理论指导，也可供高等院校相关专业师生学习参考。

本书得到了重庆市环境科学研究院、西南大学资源环境学院的大力支持，在此表示深深的谢意。此外，书中引用了许多国内外同行学者的学术观点和研究数据，虽然在引述时力求一一注明，但难免挂一漏万，在此向被引用者表示歉意和感谢。

本书囿于作者的实践经验和学术水平，疏漏和不足之处在所难免，敬请读者给予批评指正。

编者

2008年春于重庆

目 录

绪论.....	1
一、环境试验研究的目的与任务.....	1
二、环境试验研究的类型.....	1
三、环境试验研究的程序.....	2
四、环境试验研究的设计.....	3
第一章 环境试验的优化设计.....	6
第一节 环境试验的优选设计.....	6
一、单因子优选设计.....	6
二、双因子优选设计.....	9
第二节 环境试验的正交设计	17
一、正交表的含义	17
二、正交试验设计	20
三、回归正交设计	29
第三节 环境试验的均匀设计	32
一、正交设计的局限性	32
二、均匀设计的概念与特点	33
三、均匀设计表	34
四、均匀设计的步骤	38
第二章 环境数据的展示分析	41
第一节 一维定量变量的展示分析	41
一、分组数据的展示分析	41
二、未分组数据的展示分析	43
第二节 多维定量变量的展示分析	47
一、轮廓图	48
二、雷达图	48
三、调和曲线图	49

四、星座图	51
五、箱线图	53
第三节 空间序列数据的展示分析	54
一、展点图	55
二、等值线图	55
三、符号图	56
四、指示图	57
第三章 环境数据的比较分析	59
第一节 比较分析概述	59
一、假设检验	59
二、方差分析	62
第二节 环境总体特征的假设检验	63
一、总体大小特征的假设检验	63
二、总体离散特征的假设检验	66
三、总体分布特征的假设检验	70
四、总体综合特征的假设检验	73
第三节 多个环境总体的方差分析	75
一、单因子方差分析	75
二、双因子方差分析	79
第四节 协方差分析	84
一、协方差分析的意义和作用	84
二、单向分组资料的协方差分析	85
三、两向分组资料的协方差分析	90
第四章 环境数据的关系分析	95
第一节 环境数据的相关分析	95
一、偏相关分析	95
二、复相关分析	96
三、典型相关分析	97
第二节 环境数据的主成分分析	101
一、主成分分析在环境研究中的意义	101
二、主成分分析的步骤	102
三、主成分分析在环境研究中的应用	104
第三节 环境数据的对应分析	106

一、对应分析的基本原理.....	106
二、对应分析的步骤.....	107
三、对应分析在环境研究中的应用.....	109
第五章 环境数据的类别分析.....	112
第一节 环境数据的系统聚类.....	112
一、系统聚类分析的原理.....	112
二、系统聚类分析的步骤.....	113
三、系统聚类分析在环境研究中的应用.....	113
第二节 环境数据的模糊聚类.....	119
一、模糊聚类分析的原理.....	119
二、模糊聚类分析的步骤.....	120
三、模糊聚类分析在环境研究中的应用.....	121
第三节 环境数据的判别分析.....	123
一、Fisher 二类判别分析.....	123
二、距离判别分析.....	127
第六章 环境数据的序列分析.....	130
第一节 环境数据的物元分析.....	130
一、物元分析的评价模型.....	130
二、物元分析在环境研究中的应用.....	131
第二节 环境数据的投影寻踪分析.....	133
一、投影寻踪的概念与特点.....	133
二、投影寻踪分析在环境研究中的应用.....	134
第三节 环境数据的分形分维分析.....	136
一、分形.....	136
二、分维.....	138
三、分形分维在环境研究中的应用.....	140
第七章 正交试验的数据分析.....	145
第一节 无交互作用的正交试验直观分析.....	145
一、单个响应指标的饱和正交分析.....	145
二、多个响应指标的饱和正交分析.....	148
三、混合型正交试验设计的分析.....	153
第二节 交互作用的正交试验直观分析.....	155

一、表头设计	156
二、试验结果分析	156
第三节 正交设计试验的方差分析	158
一、无重复正交试验的方差分析	158
二、有重复试验的方差分析	162
第八章 均匀试验的数据分析	165
第一节 多元回归方程的建立	165
一、偏回归方程的建立	165
二、标准回归方程的建立	166
三、偏回归方程与标准回归方程的互换	167
第二节 多元回归方程的优化	169
一、全部比较法	169
二、条件值法	169
三、显著性检验法	170
四、逐步回归法	174
第三节 多元回归方程的应用	179
一、偏回归方程的应用	180
二、标准回归方程的应用	180
附录	183
附录一 矩阵特征根与特征向量	183
附录二 常用正交设计表	185
附录三 常用均匀设计表	195
附录四 常用统计用表	204
一、 t 分布临界值	204
二、 χ^2 分布临界值	205
三、 F 分布临界值 ($F_{0.05}$)	206
四、 F 分布临界值 ($F_{0.01}$)	207
五、新复极差检验临界值 ($SSR_{0.05}$)	207
六、新复极差检验临界值 ($SSR_{0.01}$)	208
七、相关系数检验临界值	209
参考文献	210

绪论

一、环境试验研究的目的与任务

环境科学的萌芽最初源于生产实践。通过生产实践，人们从对环境的大量观察中积累了许多感性认识，但往往只能从表面上或整体上去比较肤浅地、笼统地认识所发生的现象。要想深入地认识与掌握环境的内在规律性，还必须借助于科学试验。环境试验是根据一定的研究目的，运用一定的物质手段，在人为控制或模拟自然现象的条件下，使环境过程以纯粹的、典型的形式表现出来，以便进行观察、研究、探索环境本质及其规律的一种研究方法。试验结果既指导生产实践，同时还要经受生产实践的检验，随后又根据新的情况设计新的试验。如此反复的比较、观察、分析和总结，使人们对环境的认识不断地深化。

随着经济社会的发展和科学技术的进步，环境科学试验的深度、广度以及手段、规模都发生了深刻的变化，内容十分丰富，范围极为广阔。今天的科学试验，已越来越成为人们认识环境和改造环境的一项独立的社会实践活动。概而言之，除极其少数的纯理论研究外，没有环境科学试验，就无法从事环境研究活动，就不会有环境科学成果的出现和环境科学技术的发展。

实践证明现代自然科学的产生和发展与科学试验的广泛应用有着密切的联系，许多重大科学成果都是在应用新的试验手段和方法的基础上，在经历了无数次试验研究后才取得的。环境科学的产生和发展也离不开试验研究。如废水好氧生物处理就是人们在发现存在于自然中的排水经过一定时间会出现浓度降低、水质变好现象后，推测可能有某种（群）生物在废水中活动，于是经过试验便找到了能够降低废水 COD 浓度的微生物，由此产生了废水处理的活性污泥法等一系列环境生物技术。

二、环境试验研究的类型

环境试验研究按照不同的分类原则可以分成不同的类型。按试验场所及规模可分为小试、模拟中试、生产试验。小试一般在实验室内完成，其目的主要是检验原理及设想是否可行。模拟中试在模拟生产条件下进行，其目的主要是检验规

模扩大时小试结果的可靠性，并且可获得有关运行参数，为设计生产做好准备。生产试验在工厂生产车间进行，其目的则是直接修正某些运行参数，制订生产规程。

按试验因子的多少可分为单因子试验、多因子试验。单因子试验只研究某一个因子的效应，为此要求其他因子必须处在相对一致、比较良好的条件下。单因子试验在设计上比较简单，目的明确，所得结果易于分析，而且能对试验因子作深入研究，是研究某个因子具体规律时常用且有效的手段，但单因子试验往往不能了解几个因子之间的相互关系，试验结果往往具有一定的局限性。多因子试验同时研究两个或两个以上不同因子效应的试验。试验过程中，除研究因子之外，其他一切措施都应该一致。多因子试验有利于探明几个因子之间的相互关系，能够较全面地说明问题，试验效率也较单因子高。

按试验目的与性质可分为比较性试验、关系性试验、创新性试验。比较性试验在于弄清不同试验处理或试验因子所产生的试验效应的大小与好坏，包括对比试验、析因试验。关系性试验是为了研究事物之间、因子之间、事物与因子之间的关系，主要包括相关、回归及多元分析等。创新性试验则在于创新，包括发现、发明和创造等，如絮凝剂开发等。

三、环境试验研究的程序

人们在解决环境问题时往往可选择一种或几种试验研究方法，同时试验研究的深度、广度、难度也各不相同。环境试验研究中新的技术和手段的应用也层出不穷，但是纵观环境试验研究的全过程，其一般程序可分为选题、计划、实施和总结等4个阶段。

1. 选题

选题就是确定试验研究的具体目标和任务。所选题目在现有研究条件下可行性如何，是否具有理论和实际应用价值，直接关系到试验研究能否顺利完成和工作成绩的大小。

试验研究题目的来源主要有以下几个方面：当前生产中存在的急需弄清和解决的实际的理论和技术问题；创造性开发新产品，发明新技术；学科发展上需要解决的基础理论问题；引进外来新技术、新产品在本地、本厂应用前需要进行验证。

实际中和理论上需要研究的问题很多，在选题过程中必须进行深入细致的调查研究工作，才能抓住主要矛盾。对于应用性题目，一要紧密联系生产实际，二要有超前和创造意识，敢于做开拓性工作，同时对研究工作的预期结果和应用前景多方论证。

不论是应用性题目，还是理论性题目，都必须高度重视对有关文献资料的收集、整理、归纳和分析，吃透并提炼出新的可供研究的问题，在此基础上确定研究内容；其次必须对所选题目的可行性进行论证，防止在试验过程中出现进退两难、欲罢不能的局面。

2. 设计

试验题目确定之后，就要根据试验目的和要求做好试验计划，也就是设计与确定完成试验任务的方法和步骤，其具体内容大致有设计试验方案、确定试验方法、制定管理措施、确定观测指标及其方法标准。

试验计划是进行试验工作的依据。拟定试验计划，一方面要能够达到试验目的和满足对精确度的要求；另一方面又要立足现有试验条件，千方百计提高试验效率。制订出的试验计划，既有相当的可操作性，能保证完成试验任务，又具体精练，能达到事半功倍的效果，符合多快好省的原则。

3. 实施

制订试验计划后能否圆满地完成试验任务，关键在于实施。试验工作的实施过程，内容较多，时间较长，干扰因子也较多，各种数据在这个过程取得，试验误差亦在这个过程形成。实施过程的主要工作有：根据拟定的试验方案和试验方法，做好试验场所、器材、工具的准备工作；认真布置试验；做好试验的管理工作；完成试验所规定的观察记载项目与各种测定工作。

4. 分析

试验实施过程中得到的许多资料表面看来往往是杂乱无章的，其中的规律性常被试验误差所掩盖。总结就是对所取得的资料进行仔细审查，发现错误设法更正，经检验是异常值应予以剔除，然后对试验数据进行统计分析。

上述工作完成后，再撰写总结报告，报告主要内容包括试验目的和意义、试验所采用的材料和方法、列出经统计处理后制成的各类图表、对本次试验进行评价、展开讨论、提出建议等。

四、环境试验研究的设计

1. 环境试验设计的概念与组成

所谓环境试验设计，是指根据试验目的与要求，为了获得有效的试验数据，而对环境试验因子、水平、处理、重复、响应指标等要素所作的安排。

因子是指影响试验、分析、观测结果的条件，它包括定性因子与定量因子两大类。因子在试验中所取的状态（即取值）称为水平。不同因子之间的水平组合称为处理。很显然，在单因子试验中，该因子的每个水平就是一个处理。每一个处理完成的次数称为重复。用于表征试验结果大小或方向的变量称为响应指标。

任何一个环境试验设计，都不能离开上述 5 个要素。例如在设计 Zn、Cd 复合污染对植物生长发育的影响试验时，初始 Zn 添加量为 0mg/kg、20mg/kg、40mg/kg、80mg/kg，初始 Cd 添加量为 0mg/kg、0.01mg/kg、0.05mg/kg、0.10mg/kg、0.20mg/kg 等，此处，Zn、Cd 就是两个试验因子，不同的 Zn、Cd 初始添加量就是水平，因此 Zn 有 4 个水平，Cd 有 5 个水平，这些不同的水平组合在一起，就构成了 20 个完全组合，即 20 个处理。如果每个处理安排 3 次，则重复数就是 3。如果试验中观测植物生长量、植物体内 Zn、Cd 含量，则植物生长量、Zn 含量、Cd 含量就是 3 个响应指标。

2. 环境试验设计的基本要求

(1) 目的针对性 即试验方案对目的具有导向性。任何一个环境试验都有一定的目的与任务。这些目的与任务有探索环境问题的成因，阐明环境过程的变化特征，获取环境评价的信息等。试验方案应保证试验实施后，目的能够达到，任务能够完成。

(2) 条件代表性 试验是从总体中抽出一些样本，然后进行特征研究，其结果能否代表总体是试验设计的首要要求。试验条件应该能代表将来准备推广该试验结果的地区的自然条件和生产条件，对科技成果的转化具有重要的意义。目前我国科技成果转化率偏低，科技成果对经济发展的贡献率不到 40%，与试验条件的代表性有很大的关系。因此，在设计时，既要考虑目前的条件，还要预见到将来变化，使试验结果既能符合生产需要，又为今后的生产发展做储备。

(3) 测定精密性 包括准确性与精密性。如某标准样品 $\mu_0 = 0.05\text{mg/kg}$ ，A 的分析结果为 0.030mg/kg、0.050mg/kg、0.070mg/kg；B 的结果为 0.051mg/kg、0.050mg/kg、0.052mg/kg；C 为 0.080mg/kg、0.081mg/kg、0.080mg/kg，则 A 的准确性好，精确性差（有偶然误差），B 的准确性、精确性都好，C 的准确性差，精确性好（有系统误差）。

(4) 结果重演性 相同的条件下进行重复试验，试验结果能获得相同的规律性。由于偶然因子的存在，两次试验结果的绝对数值是不可能完全相同的。试验无重演性，就失去推广、应用价值。要保证试验重现性，除了试验本身有较高的代表性与精密性外，还应用严谨求实的科学态度，绝不允许主观修改与取舍。

(5) 成本低耗性（方案优化性） 全部试验要尽可能降低总成本。由于每个试验所耗的人力、财力、物力大体相同，因此要降低总成本，就必须尽可能减少试验设计的处理数，即进行优化设计。

3. 环境试验设计的作用

环境试验设计的作用表现在分清试验因子对试验响应指标影响的大小顺序，

找出主要因子、直接因子；了解试验因子对试验响应指标影响的规律性；了解试验因子之间相互作用的机理；寻找最优的生产条件或工艺条件，预测估计或控制一定条件下的试验响应指标值及其变化范围；正确估计和有效控制、降低试验误差，从而提高试验精度。

第一章 环境试验的优化设计

第一节 环境试验的优选设计

一、单因子优选设计

1. 非均分设计

试验范围不是按等分间隔。一种是正态设计，即在优点附近布点密集，两侧间距渐大。另一种是非正态设计，在起点或终点附近布点密集，又可分为左偏设计（左侧间距渐大）和右偏设计（右侧间距渐大），如重金属对作物的生态效应，或污水灌溉的作物效应。

2. 黄金分割设计

黄金分割是我国已故数学家华罗庚最先提出的，其特征数是 0.618，它是 $(\sqrt{5}-1)/2=0.618033989$ 的 3 位小数近似值。

【例 1-1】 混凝法处理废水中，絮凝剂的添加量太多、太少都不好，究竟要加多少这种絮凝剂才能使其效果最好呢？这就是个优选问题。从实践中已知其最佳加入量在 100~200mg/L 之间的某一点，现在通过试验来找到它：先在试验范围内 100~200mg/L 的 0.618 处进行第一次试验（图 1-1），这一点的加入量由下列公式给出

$$\text{第①试点} = (\text{大} - \text{小}) \times 0.618 + \text{小} \quad (1-1)$$

$$\text{第①试点的加入量为: } (200 - 100) \times 0.618 + 100 = 161.8 \text{ (mg/L)}$$

再在第①试点的对称点处进行第二个试验，此点的加入量由下列公式给出：

$$\text{第②试点} = \text{大} + \text{小} - \text{中} \quad (1-2)$$

$$\text{第②试点加入量为: } (200 + 100) - 161.8 = 138.2 \text{ (mg/L)}$$

将两次试验结果进行比较，如果第②点比第①点好，则去掉 161.8mg/L 以

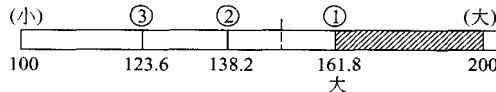


图 1-1 絮凝试验的 0.618 设计 (1)

上的部分，然后在留下的部分再找出第②点的对称点，在此作第③个试验，即③点处的加入量仍由式(1-2)给出，即

$$\text{第③试点} = (100 + 161.8) - 138.2 = 123.6 \text{ (mg/L)}$$

再比较②、③两点的试验结果，如果仍然是②点处较好，则去掉 123.6 mg/L 以下的部分，再在留下的部分继续找出第②点的对称点，进行第④个试验（图 1-2）。

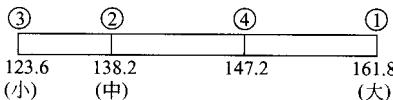


图 1-2 絮凝试验的 0.618 设计 (2)

$$\text{第④试点加入量} = (123.6 + 161.8) - 138.2 = 147.2 \text{ (mg/L)}$$

对②、④点的结果进行比较，如果第④点已经令人满意，则试验到此结束。如果④点还未达到要求，且第④点又比②点好，就去掉第②点左端部分，在保留下的部分中按同样的方法做下去，如此继续进行，就一定会找到最佳点。

0.618 法的要点是先在试验范围的 0.618 处做第①次试验，再在其对称点作第②次试验，继而比较两次试验结果，去掉“坏点”，留下的点所在的那一段，在留下部分继续按式(1-2)进行，如此“实践、认识、再实践、再认识……”，循环往复，每次都去掉试验范围总长的 0.382，留下的总是范围总长的 0.618，一次比一次更接近最好点，直到取得预计的精度。

上述试验取精度 $< 10 \text{ mg/L}$ ，如果用均分法，至少得 9 次试验，而用 0.618 法仅需 4 次便可找到优点。计算表明，对于单因素问题，用 0.618 法做 10 次试验的精度相当于均分法做 140 次，做 15 次相当于 1500 次，19 次便相当于 10000 次了。

在具体使用 0.618 法时，可用 6 句话帮助记忆：“一个原则一个数，两个公式要记住，第一公式用一次，第二公式反复用，去掉坏点留好点，反复试验得结果。”其中原则是指“重实践，抓主要矛盾”的原则。“数”就是指 0.618 这个数字。

在使用 0.618 法时，范围是重要的，要求根据经验仔细估算。当然估得不对也不要紧，因为在这种情况下，优选法给出的最好点将落在边界上，它并非结论，需要超出边界，再做试验。

应该指出，根据 0.618 优选的好点是相对的。条件变了，就需要另行优选，这包括改变优选范围与另选优选因素两个方面，即“认识无穷尽，优选无止境”。

在试验范围 L 内试验 n 次后，达到精确度 ϵ ，则 n 必须满足

$$0.618^n \times L \leq \epsilon \Rightarrow n \geq 4.8(\lg L - \lg \epsilon) \quad (1-3)$$

3. 分数法设计

有时由于各种原因，只允许进行一定数量的试验，而且须将试验范围均分，以确定最好的分点。这在军事上经常遇到，例如为确定某一参数（如怎样的射击角度才具有最大杀伤力），要进行打炮演习，打几炮呢？不能打了再说，而是要预先批准的。因此，要问给定试验的个数时，怎样才能使试验范围尽可能分得细密些？即每试验一次，需要付出很大代价。

【例 1-2】 某单位要确定一个化学反应的较好温度，已知 120℃ 不起反应，200℃ 碳化，希望进行 4 次试验找出较好温度。起初想这样安排（见图 1-3）：



图 1-3 化学试验的均分设计

进行 130℃、150℃、170℃、190℃ 下的 4 个试验，精度是 $\pm 20^\circ\text{C}$ 。后来改为（见图 1-4）：先进行试验①，对折试验②。②比①好，去掉 170~200℃，对折而试验③。还是②好，又去掉 120~140℃，再试验④，仍是②好。于是②最好。精度达 $\pm 10^\circ\text{C}$ 。同样 4 个试验，安排不同，精度提高 1 倍。

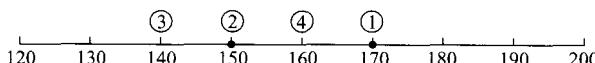


图 1-4 化学试验的分数法设计

粗看起来，就是将试验范围 0 到 1 分为 8 等分，从 $5/8$ 出发，与 0.618 的办法一样，对折寻找下一试验点，4 次便找到最好的分点。同样，将试验范围 (0, 1) 分为 13 等分，从 $8/13$ 出发，5 次找到最好分点；分 21 等分，从 $13/21$ 出发，6 次找到最好分点……这种方法就称为“分数法”。

因为分数 $1/2, 2/3, 3/5, 5/8, 8/13, 13/21 \dots$ 就是 $(\sqrt{5}-1)/2 = 0.618$ 的渐近分数，“分数法”也就是用这些分数来代替 0.618 的办法。怎样求得这些分数呢？它是数列 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21……相邻两数的商，而数列的构造，前两项均为 1，而后每一项都是其前面两项之数的和。

如何用分数来近似地表示 $(\sqrt{5}-1)/2$ 呢？如果用分数来近似地表示 $(\sqrt{5}-1)/2$ ，当然要求分母小，近似程度又尽可能地好。

分数法所使用的公式可归纳如下：

$$(大-小) \times F_n/F_{n+1} + 小 = 第①试点 \quad (1-4)$$

$$(大+小)-中 = 第②试点 \quad (1-5)$$

它与 0.618 法不同之处仅在第①试点的取法，其余则完全相同的。