



安徽理工大学

ANHUI UNIVERSITY OF SCIENCE & TECHNOLOGY

研究生课程

# 试验设计与分析

主讲 闵凡飞 教授

材料科学与工程学院

2020年5月

# 第三章 试验设计方法

## -单纯形调优法

## 3.6 单纯形优化设计

### 1. 单纯形优化法

(1) **单纯形**是代数拓扑中最基本的概念。单纯形是某个 $n$ 维以上的欧几里得空间中的 $(n+1)$ 个仿射无关（也就是每个 $m$ 维平面包含 $m+1$ 个点；这样的点集被称为处于一般位置的点的集合的凸包）。

例如，0-单纯形就是点，1-单纯形就是线段，2-单纯形就是三角形，3-单纯形就是四面体，而4-单纯形是一个五胞体（每种情况都包含内部）。

(2) **单纯形优化法**是利用图形的对称原理将单纯形向前推移，即将试验中欲去掉的效果最坏的试验点沿经过单纯形的形心点的延长线作等距离（或根据需要调整距离）的反射，经过若干次单纯形推移之后，找出最优的试验条件。

## 2. 发展简史

1962年，Spendley提出基本单纯形法。

1965年，Nelder等提出改进单纯形法。

之后，Routh提出加权形心法与控制加权形心法。

## 3. 单纯形法优点

和正交试验相比的特点：

- ◆ 计算简便
- ◆ 不受因素数的限制
- ◆ 因素数的增加不会导致试验次数大量增加
- ◆ 它属于非线性动态调优过程

和单因素试验法相比的特点：

- ◆克服了单因素试验法无法考察交互作用的缺点。
- ◆准确性相对高。
- ◆因素数的增加不会导致试验次数大量增加。

## 4. 基本单纯形法

### (1) 双因素基本单纯形法

如果我们有一个试验设计，只选有两个影响因素，即因素数为2。分别取值 $a_1$ 和 $a_2$ 作为试验的初点（因素水平）。记为 $A(a_1, a_2)$ 。对其余两个点分别设为B和C，再设三角形的边长为 $\alpha$ （步长）。那么B、C点就可以计算出来。

假设AB、AC、BC间距均为 $\alpha$ ，由等边三角形可以算出B点为：

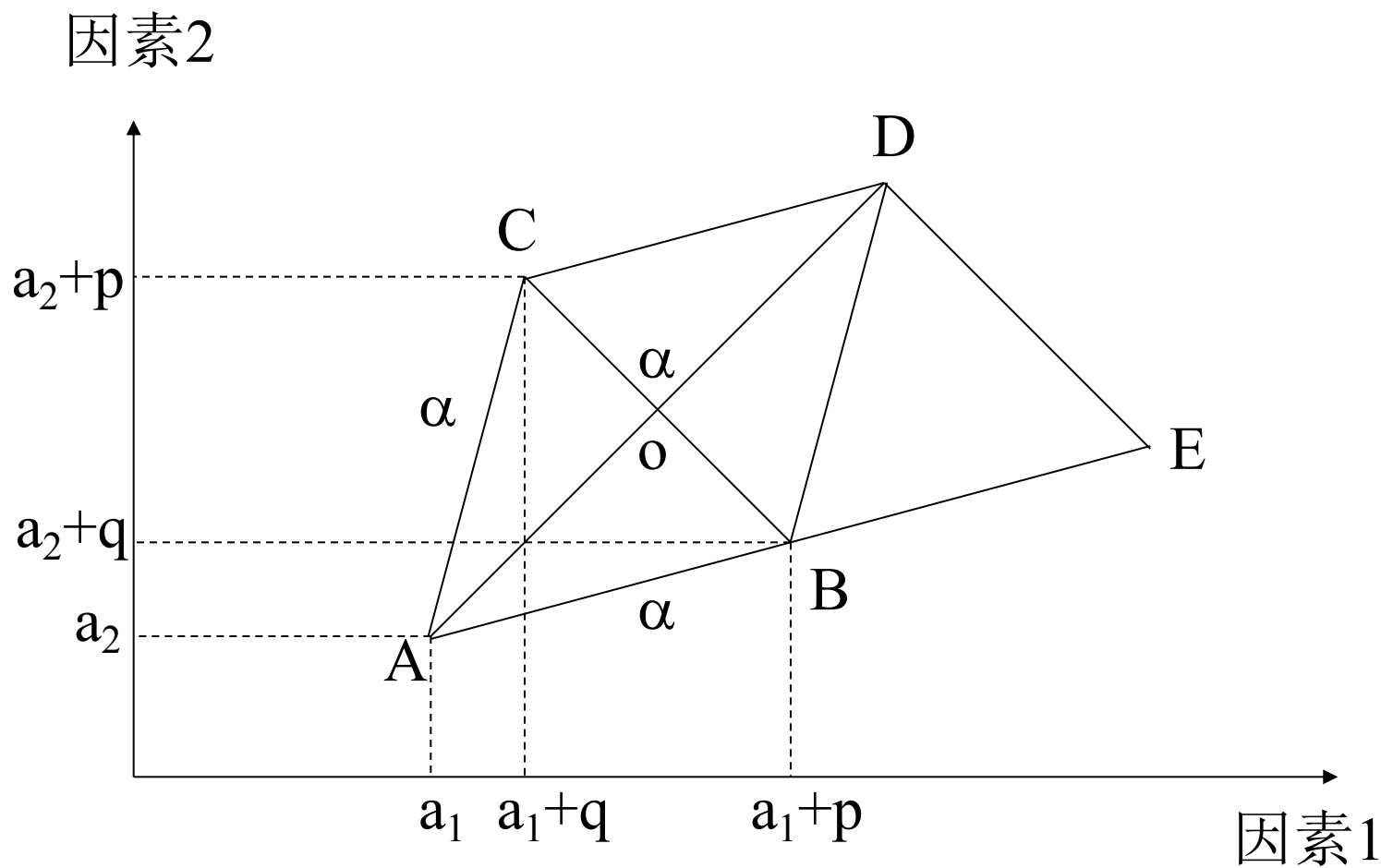
$$B=(a_1+p, a_2+q)$$

根据对称性可知：

$$C=(a_1+q, a_2+p)$$

可以根据等边三角形性质解得：

$$\begin{cases} q = \frac{\sqrt{3}-1}{2\sqrt{2}}a \\ p = \frac{\sqrt{3}+1}{2\sqrt{2}}a \end{cases} \quad \text{式1}$$



由A、B、C三点构成得单纯形称为**初始单纯形**。

首先在A、B、C三点下分别试验，得出三个试验值，比较其大小，找出最坏试验值的点称为**坏点**。

此处设A为坏点，去掉A点并取A的对称点D点作为新试验点，比较B、C、D三点试验值的好坏

此处设C为坏点，去点C点，取其反点E，此时C、D、E三点又构成新的单纯形

.....

重复以上结果，最终达到优化试验的目的



## (2) 新试验点的计算方法

以初始单纯形A、B、C为例，设A为坏点，A应该去掉，求其反射点D，此时

$$A(a_1, a_2), B=(a_1+p, a_2+q), C=(a_1+q, a_2+p)$$

$$D=B+C-A=(a_1+p+q, a_2+p+q)$$

相同的方法求E点

$$E=B+D-C=(a_1+2p, a_2+2q)$$

即：[新试验点]=[留下各点之和]—[去掉点] (式2)

### (3) 多因素基本单纯形

设有 $n$ 个因素 $n+1$ 个定点构成的 $n$ 维空间单纯形，设有一点

$A=(a_1, a_2, a_3, \dots a_n)$ ，步长为 $\alpha$ 。

则其余各点为：

$$B=(a_1+p, a_2+q, a_3+q, \dots \dots a_n+q)$$

$$C=(a_1+q, a_2+p, a_3+q, \dots \dots a_n+q)$$

$$(\text{第}n\text{点})=(a_1+q, a_2+q, \dots a_{n-1}+p, a_n+q)$$

$$(\text{第}n+1\text{点})=(a_1+q, a_2+q, a_3+q, \dots \dots a_n+p)$$

其中

$$\begin{cases} q = \frac{\sqrt{n+1} + n - 1}{\sqrt{2} \times n} a \\ p = \frac{\sqrt{n+1} - 1}{\sqrt{2} \times n} a \end{cases} \quad \text{式3}$$

新点计算

$$[\text{新坐标点}] = 2 \times [\text{n个留下点的坐标和}] / \text{n} - [\text{去掉点坐标}] \quad (\text{式4})$$

## (4) $n$ , $p$ , $q$ 取值对应表

由(式3) 我们可以算出 $n$ 取不同值的 $p$ 、 $q$ 的取值。

$n$ 、 $q$ 、 $p$ 取值对应表

$n$	$p$	$q$	$n$	$p$	$q$
2	0.966 $\alpha$	0.259 $\alpha$	9	0.878 $\alpha$	0.171 $\alpha$
3	0.943 $\alpha$	0.236 $\alpha$	10	0.872 $\alpha$	0.165 $\alpha$
4	0.926 $\alpha$	0.219 $\alpha$	11	0.865 $\alpha$	0.158 $\alpha$
5	0.911 $\alpha$	0.204 $\alpha$	12	0.861 $\alpha$	0.154 $\alpha$
6	0.901 $\alpha$	0.194 $\alpha$	13	0.855 $\alpha$	0.148 $\alpha$
7	0.892 $\alpha$	0.185 $\alpha$	14	0.854 $\alpha$	0.147 $\alpha$
8	0.883 $\alpha$	0.176 $\alpha$	15	0.848 $\alpha$	0.141 $\alpha$

## (5) 小结

对两因素问题A、B、C构成初始单纯形，在此三点进行试验

规则1：去掉最坏点，用其对称反射点作新试点

例A、B、C中，若A为最坏点，去掉A点并取A的对称点D点作为新试验点。

$$D = [\text{留下各点之和}] - [\text{去掉点}] = B + C - A$$

在B、C、D三角形中继续使用规则1，如果C为坏点，去点C点，取其反点E，此时C、D、E三点又构成新的单纯形。

如果最坏点为D那么对称点就会返回到与A重合，此时改用规则2。

规则2：去掉次坏点，用其对称反射点作新试点对称计算公式与前面相同。

经过反复使用后，如果有一个点老是保留下来，必须使用规则3

规则3：重复、停止和缩短步长

一般一个点经3次单纯形后仍未被淘汰，它可能是一个很好点，也可能是偶然性或试验误差导致的假象。

此时需要重复试验：结果不好，淘汰；结果已很满意则停止试验，反之则以它为起点缩短步长，继续试验。

## (6) 特殊方法

前面介绍的单纯形是正规的，任意两点间的距离一样，实际上，这个要求可以不要。尤其是由于各个因素所取的量纲不一样（例如一个因素是温度（ $^{\circ}\text{C}$ ），另一个因素是时间（秒））。即使量纲一样所取的单位也可以不一样。

### （一）直角单纯形法

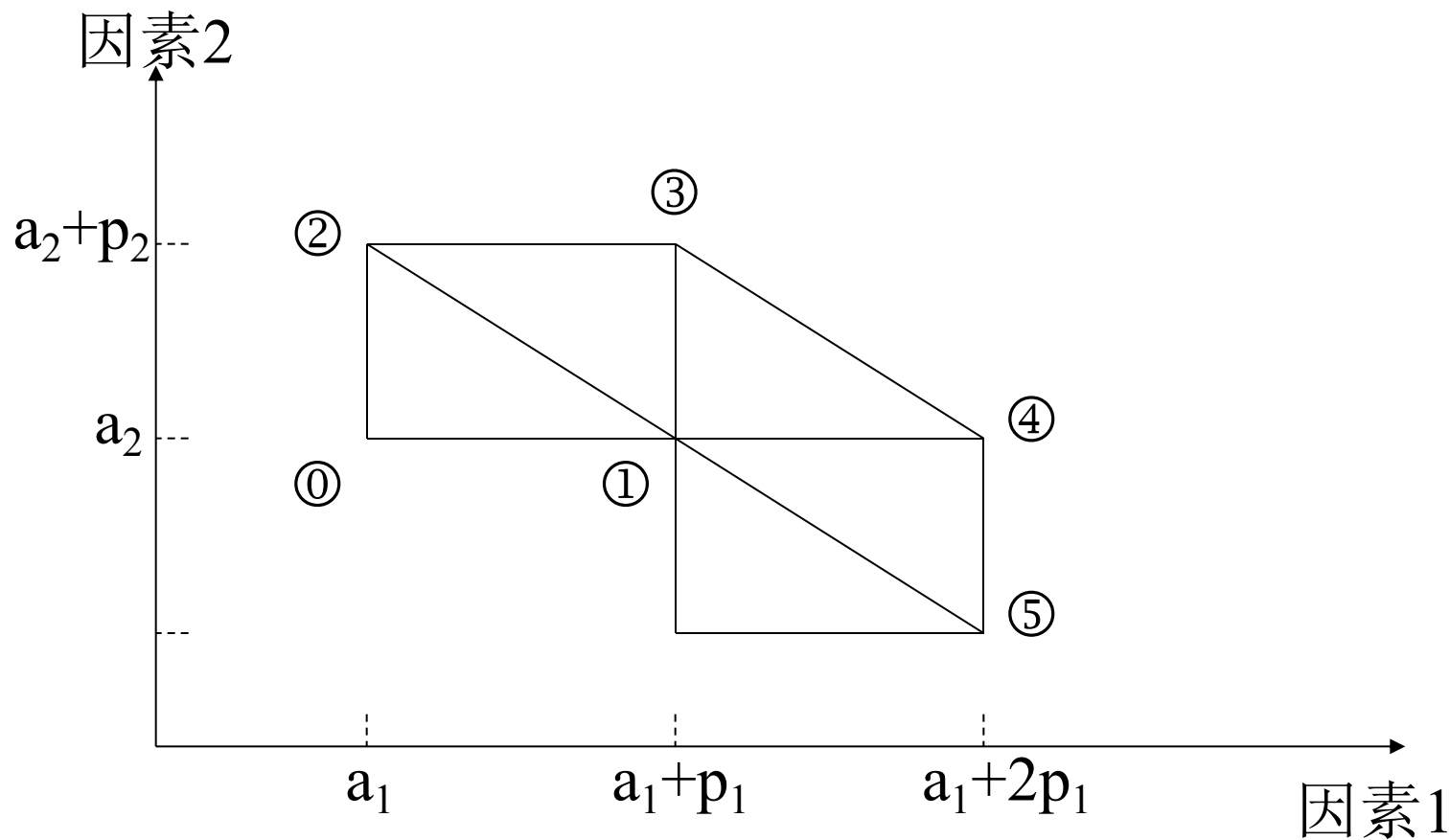
我们考虑双因素模型，开始不从正三角形出发，而是从一个直角三角形出发，其顶点取值如下：

$$\textcircled{0}=(a_1,a_2)$$

$$\textcircled{1}=(a_1+p_1,a_2)$$

$$\textcircled{2}=(a_1,a_2+p_2)$$

用图表示如下





同样比较三个顶点响应值的结果，若①最坏，则新点③就用对称公式

$$\textcircled{3} = \textcircled{1} + \textcircled{2} - \textcircled{1} = (a_1 + p_1, a_2 + p_2)$$

在得到③点后，再用①、②、③三点试验，比较其结果，若②最坏，则取其对称点④做新试验点

$$\textcircled{4} = \textcircled{3} + \textcircled{1} - \textcircled{2} = (a_1 + 2p_1, a_2)$$

①、③、④构成一个新单纯形，比较其结果，若④最坏，则用规则2去掉次坏点，若次坏点为③，则新点

$$\textcircled{5} = \textcircled{1} + \textcircled{4} - \textcircled{3} = (a_1 + 2p_1, a_2 - p_2)$$

如此等等，有时还会使用规则3，直至结果满意为止。

一般在任意 $n$ 个因素时

$$\textcircled{0} = (a_1, a_2, a_3, \dots a_n)$$

$$\textcircled{1} = (a_1 + p_1, a_2, a_3, \dots a_n)$$

$$\textcircled{2} = (a_1, a_2 + p_2, a_3, \dots a_n)$$

.....

$$(n) = (a_1, a_2, \dots a_{n-1} + p_{n-1}, a_n)$$

$$(n+1) = (a_1, a_2, a_3, \dots a_n + p_n)$$

## 5.改进单纯形法

- 为了解决优化结果精度和优化速度的矛盾，可以采用可变步长推移单纯形，此即改进单纯形法，既能加快优化速度，又能获得较好的优化精度。
- 改进单纯形法是1965年J. A. Nelder等提出来的，它是在基本单纯形法的基础上引入了反射、扩大、收缩与整体收缩规则，变固定步长为可变步长，较好地解决了优化速度与优化精度之间的矛盾，是各种单纯形优化法中应用最广泛的一种单纯形优化方法。

■ 在单纯形的推移过程中，新试验点在空间的位置坐标按以下方法计算：

$$[\text{新试验点的坐标}] = (1+a) \times \frac{[\text{留下各点的坐标和}]}{n} - a \times [\text{去掉点的坐标}]$$

式5

讨论：

$a=1$ ，此时(式5)变为基本单纯形中新点的计算公式，此时新试验点为去掉点的等距离反射点，这时改进单纯形又变成了基本单纯形。

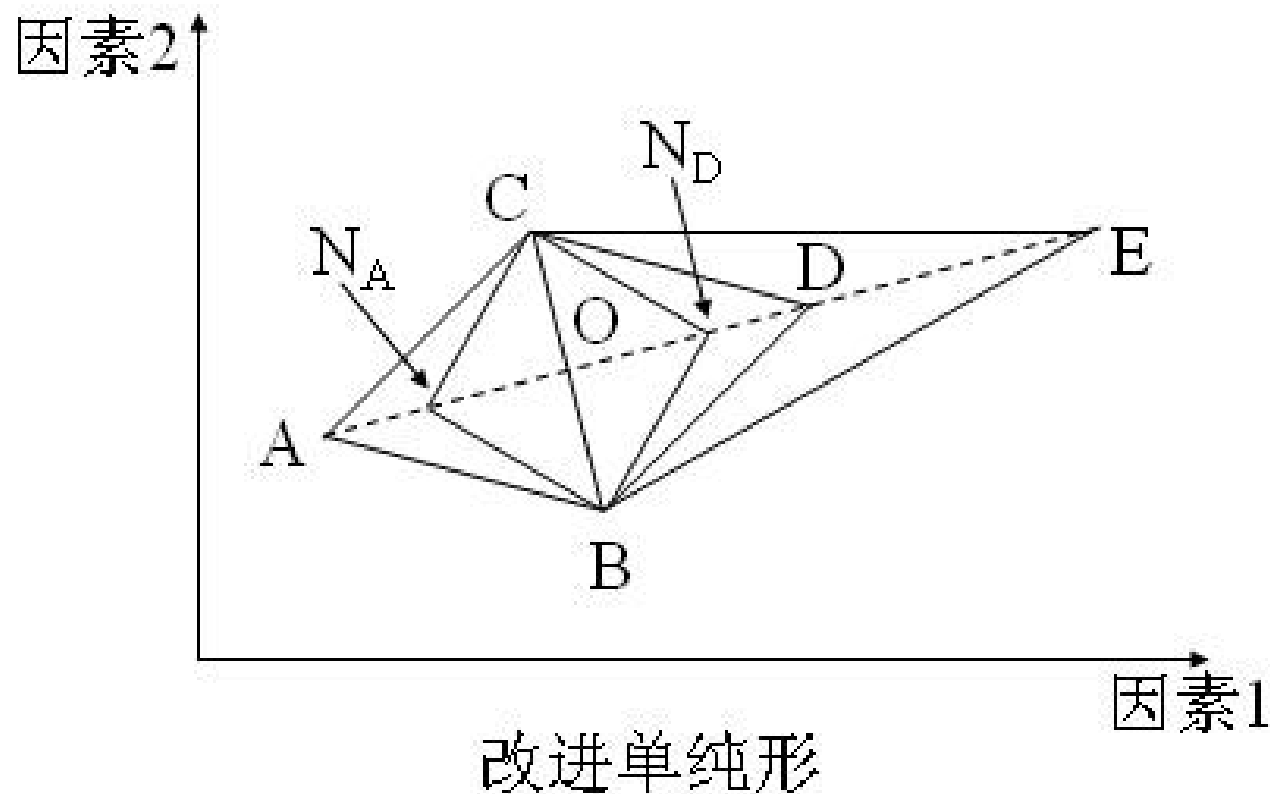
$a > 1$ ，按基本单纯形法（ $a = 1$ ）计算出新点后，对新试验点做试验得出新试验点的响应值。如果新点的响应值好，说明我们搜索方向正确，可以进一步沿**AD**搜索。因此取 $a > 1$ ，称为**扩大**。如果扩大点**E**不如反射点**D**好，则“扩大”失败，仍采用**D**，由反射点与留下点构成的单纯形**BCD**继续优化。

$-1 < a < 0$ ，按（ $a=1$ ）计算出来的反射点D的响应值最坏，此时采用 $-1 < a < 0$ （称为内收缩）计算新试验点，此时形成新的单纯形 $BN_A C$

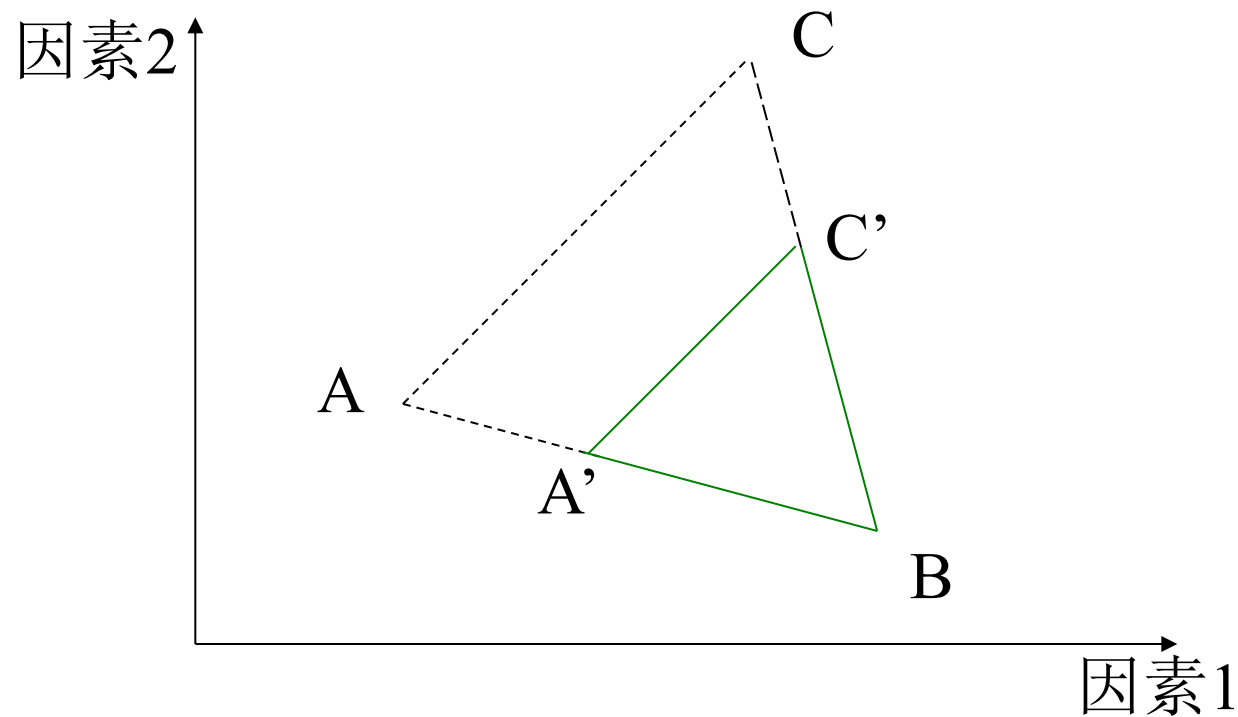
$0 < a < 1$ ，按基本单纯形法（ $a=1$ ）计算除反射点D响应值最坏。但比去掉点A响应值好。此时采用 $0 < a < 1$ ，称为收缩，新试点仍按(式5)式计算，此时形成新的单纯形 $BCN_D$

如果去掉点与其反射点连线AD方向上所有点的响应值都比去掉点A坏，则不能沿此方向搜索。这时应以单纯形中最好点为初点，到其它各点的一半为新点，构成新的单纯形 $BA'C'$ 进行优化。此时步长减半，称为“整体收缩”

## ■ 两因素单纯形的推移过程



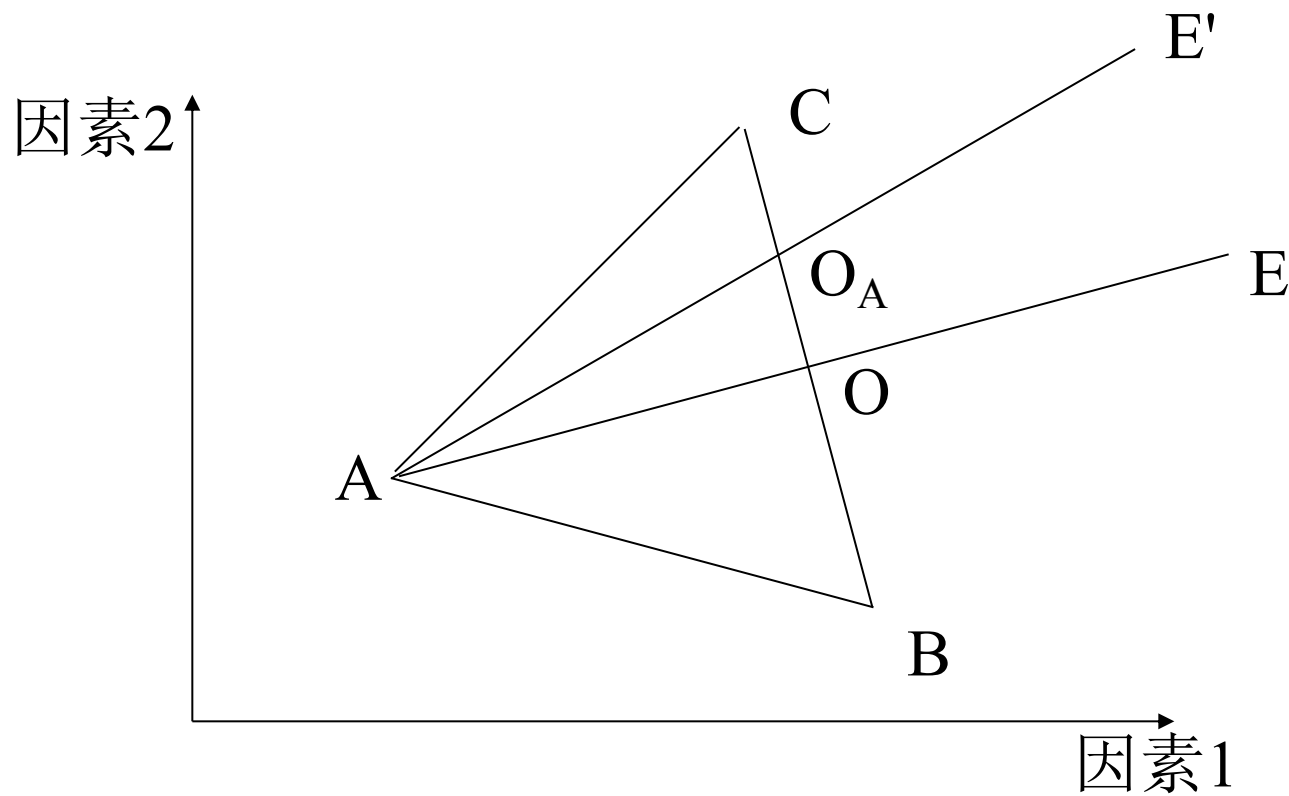
## ■ 单纯形的整体收缩





## 6. 加权形心法

- 基本单纯形和改进单纯形都是采用去掉点的反射方向为新试验点的搜索方向，这就意味着，去掉点的反射方向作为近似的优化方向，就是梯度变化最大的方向。
- 实际上，这个方向是一个近似的梯度最大方向，这样的搜索结果可能导致搜索次数的增加和搜索结果精度的降低。
- 为了解决这个问题，提出了加权形心法，加权形心法利用加权形心代替单纯的反射形心，使新点的搜索方向更接近实际的最优方向。



形心点O和加权形心点 $O_A$

如图所示，使A、B、C三个顶点组成的一个二因素的优化过程的一个单纯形，并知A点的响应最坏，C的响应最好。

如果搜索优化过程中函数不出现异常，那么搜索最优点的方向明显应当更靠近AC的方向，而不是靠近AB的方向。因此可以通过加权的办法来使搜索的方向由原来的AE（反射方向）变为AE'方向（加权方向），此时用加权形心点 $O_A$ 代替反射形心点O

$$\text{加权形心点}[O_{\omega}] = \frac{\sum_{i=1}^3 \{R(p_i) - R(\omega)\} \times p_i}{\sum_{i=1}^3 \{R(p_i) - R(\omega)\}}$$

其中

$p_i$ 为第*i*点的坐标

$R(p_i)$ 为第*i*点的响应值。

$R(\omega)$ 为最坏点的响应值。

同样对于n因素的加权形心点计算如下：

$$[O_{\omega}] = \frac{\sum_{i=1(i \neq \omega)}^{n+1} \{R(p_i) - R(\omega)\} \times p_i}{\sum_{i=1(i \neq \omega)}^{n+1} \{R(p_i) - R(\omega)\}} \quad ($$

然后将 $[O_{\omega}]$ 代替改进单纯形法中的形心点 $[O]$ ,  
即成为加权形心法。

## 7. 单纯形优化的参数选择

- 在试验中，我们只研究优化条件，用基本单纯形法时，首先必须确定研究的因素。
- 由于单纯形法不受因素的限制，考察的因素可以相对的多些。
- 因素确定后，据分析仪器和试验要求，规定因素变化的上下限，据上下限的范围确定步长的大小。
- 步长（因素水平间隔）较大，优化速度加快，精度较差；步长太小试验次数增多，优化速度变慢。

## (1) 初始单纯形的构成

根据前面介绍的方法是根据初始点和步长来计算初始单纯形的各个顶点，各因素的步长是相同的。实际过程中，各因素步长和单位并不相同，利用这种方法会变得很麻烦，在实际应用中问题较多，为此，介绍两个构成初始单纯形的方法。

### ① long系数表法

D.E.Long提出一种用系数表构成初始单纯形各顶点的方法，可以解决试验设计中初始单纯形的构成问题，使用时把表中的对应值乘上该因素的步长后，再加入到初始点坐标上。

Long系数表

<div>因素</div> <div>顶点</div>	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	1.00	0	0	0	0	0	0	0	0	0
3	0.50	0.866	0	0	0	0	0	0	0	0
4	0.50	0.289	0.817	0	0	0	0	0	0	0
5	0.50	0.289	0.204	0.791	0	0	0	0	0	0
6	0.50	0.289	0.158	0.158	0.775	0	0	0	0	0
7	0.50	0.289	0.204	0.158	0.129	0.764	0	0	0	0
8	0.50	0.289	0.204	0.158	0.129	0.109	0.756	0	0	0
9	0.50	0.289	0.204	0.158	0.129	0.109	0.094	0.750	0	0
10	0.50	0.289	0.204	0.158	0.129	0.109	0.094	0.083	0.745	0
10	0.50	0.289	0.204	0.158	0.129	0.109	0.094	0.083	0.075	0.742



例：有一个二因素的设计过程，其初始点为  
(10.0,2.0)；步长为1.0和0.5，据Long系数表来计算  
其余两个顶点的坐标

顶点1： (10.0,2.0)

顶点2： (10.0+1.00×1.0, 2.0+0×0.5)  
= (11.0,2.0)

顶点3： (10.0+0.5×1.0, 2.0+0.866×0.5)  
= (10.5, 2.433)

## ②均匀设计表法

利用Long系数表法所构成的初始单纯形各顶点在空间的分布是不均匀的，因此进行的是不均匀优化

均匀设计表改变了这个缺点，使各顶点在空间均匀分布，这样进行的优化就是**整体的均匀优化**。

据所选因素的因素数，确定一个比较合适的均匀表，使用时把表中的对应数值乘以响应因素的步长，加到初始点坐标上即可。

例：我们有一个四因素的优化过程，因此可以选用四因素的均匀设计表。设初点为 $(1.0, 1.0, 1.0, 1.0)$ ；步长为： $0.5, 1.0, 1.5, 2.0$ 。要求计算初始单纯形的各顶点。

# 四因素均匀设表 $U_5(5^4)$

列号 (因素) 次数 (顶点)	A	B	C	D
1	1	2	3	4
2	2	4	1	3
3	3	1	4	2
4	4	3	2	1
5	5	5	5	5

顶点1:

$$(1.0+1 \times 0.5, 1.0+2 \times 1.0, 1.0+3 \times 0.5, 1.0+4 \times 2.0) \\ = (1.5, 3.0, 5.5, 9.0)$$

顶点2:

$$(1.0+2 \times 0.5, 1.0+4 \times 1.0, 1.0+1 \times 0.5, 1.0+3 \times 2.0) \\ = (2.0, 5.0, 2.5, 7.0)$$

顶点3:

$$(1.0+3 \times 0.5, 1.0+1 \times 1.0, 1.0+4 \times 0.5, 1.0+2 \times 2.0) \\ = (2.5, 2.0, 7.0, 5.0)$$

顶点4:

$$(1.0+4 \times 0.5, 1.0+3 \times 1.0, 1.0+2 \times 0.5, 1.0+1 \times 2.0) \\ = (3.0, 4.0, 4.0, 3.0)$$

顶点5:

$$(1.0+5 \times 0.5, 1.0+5 \times 1.0, 1.0+5 \times 0.5, 1.0+5 \times 2.0) \\ = (3.5, 6.0, 8.5, 11.0)$$

### (3) 单纯形的收敛

单纯形收敛的检验办法：

在 $n$ 个因素的单纯形中，如果有一个点经 $n+1$ 次单纯形仍没有被淘汰，一般可以在此点收敛。

这种检验方法未考虑到试验误差的存在，按数理统计或实际工作要求单纯形收敛准则应为：

$$|[R(B)-R(\omega)]/R(B)| < \varepsilon$$

式中 $R(B)$ 和 $R(\omega)$ 分别代表最好点 $B$ 与最坏点 $\omega$ 的响应值， $\varepsilon$ 为试验误差或预给定的允许误差。

# 应用举例

注：由于仪表读数问题，所以经计算后的反射点值，都取用“实用值”，进行试验和参加新单纯形控制形心点的计算。

例 2：用火焰 A A S 测定粮食作物中的 N i。粮食中的 N i 含量只有 0.xppm，选择合适的测量条件是很重要的，下面用单纯形法对测量条件进行优化，并比较了用 L ong 系数法和均匀设计法布点的优劣效果。试验是在日立 180－80 型原子吸收分光光度计上用 N i 含量为 2 μg /m l 的稀溶液进行。表 10-12 出了火焰法测量 N i 的初始点条件、步长和界限。

表 10-12 各因素的初始水平、步长和界限

因 素	下界	初始水平	步长	上界
空气压力(大气压)	1.0	1.15	0.10	1.6
乙炔压力(大气压)	0.1	0.25	0.05	0.4
燃器高度(m m)	6.0	10	1.00	15.0
灯电流(m m)	6.0	10	1.00	12.0

Long系数法确定初始单纯形，一般方法确定新试验点。

表 10-13 四因素单纯形法测定粮食中Ni的试验

实验号 (顶点)	保留顶点	空气压力 (大气压)	乙炔压力 (大气压)	燃器高度 (mm)	灯电流 (mA)	吸光度	吸收系数 ( $\times 10^{-2}$ )	最坏点	标准差 ( $\times 10^{-2}$ )	注
1		1.15	0.25	10	10	0.102	2.12		0.16	
2		1.25	0.25	10	10	0.103	1.97		0.15	
3		1.20	0.29	10	10	0.101	2.02		0.15	
4		1.20	0.26	10.82	10	0.094	1.88		0.21	
5		1.20	0.26	10.20	10.80	0.095	1.90	4	0.08	
6	1, 2, 3, 5	1.20	0.27	9.28	10.40	0.111	2.22	5	0.18	
7	1, 2, 3, 6	1.20	0.27	9.44	9.40	0.110	2.21	2	0.18	
8	1, 3, 6, 7	1.13	0.29	9.36	9.90	0.108	2.26	3	0.10	扩大
9	1, 3, 6, 7	1.09	0.29	9.20	9.98	0.110	2.44	3	0.12	扩大
10	1, 6, 7, 9	1.12	0.25	8.96	9.84	0.109	2.42	1	0.12	反射
11	6, 7, 9, 10	1.16	0.29	8.44	9.76	0.112	2.34	7	0.16	反射
12	6, 9, 10, 11	1.09	0.28	8.50	10.50	0.110	2.45	6	0.15	反射
13	9, 10, 11, 12	1.03	0.29	8.27	9.61	0.113	2.38		0.13	反射

顶点1:  $= (1.15, 0.25, 10, 10)$

顶点2:  $(1.15+1.00 \times 0.1, 0.25+0 \times 0.05, 10+0 \times 1.0, 10+0 \times 1.0) = (1.25, 0.25, 10, 10)$

顶点3:  $(1.15+0.50 \times 0.1, 0.25+0.866 \times 0.05, 10+0 \times 1.0, 10+0 \times 1.0) = (1.20, 0.29, 10, 10)$

顶点4:  $(1.15+0.50 \times 0.1, 0.25+0.289 \times 0.05, 10+0.817 \times 1.0, 10+0 \times 1.0) = (1.20, 0.26, 10.82, 10)$

顶点5:  $(1.15+0.50 \times 0.1, 0.25+0.289 \times 0.05, 10+0.204 \times 1.0, 10+0.791 \times 1.0) = (1.20, 0.26, 10.20, 10.79)$

[新坐标点] =  $2 \times [\text{n个留下点的坐标和}] / \text{n}$   
 $- [\text{去掉点坐标}]$

顶点6: 因素1:  $2 \times (1.15+1.25+1.20+1.20) / 4 - 1.20 = 1.20$

因素2:  $2 \times (0.25+0.25+0.29+0.26) / 4 - 0.26 = 0.27$

因素3:  $2 \times (10+10+10+10.20) / 4 - 10.82 = 9.28$

因素4:  $2 \times (10+10+10+10.79) / 4 - 10 = 10.40$



下面利用均匀设计表建立初始单纯形,四个因素应有 5 个顶点,应选用  $U_5(5^4)$  均匀设计表,表 10-14 列了用  $U_5(5^4)$  表设计的初始点单纯形的各顶点,表 10-15 为初始单纯的试验结果和推进情况。

根据均匀设计表格成的初始单纯表的顶点均匀分布在整个试验范围内,因此单纯形只推进一次就找到了最优条件。用 Long 系数表构成的初始单纯形,需推 4 次,即第 9 次实验才找到最优条件。由此可见,用均匀设计表构成初始单纯形,在寻找最优条件方面具有一定的优点。用上述两种方法得到的优化条件不尽相同,其原因是因素之间存在多种组合方式实现目标的最优化。

表 10-14 用  $U_5(5^4)$  表设计的初始单纯形的各点

顶点	因 素			
	1. 空气压力	2. 乙炔压力	3. 燃器高度	4. 灯电流
1	(1) 1.15	(2) 0.25	(3) 10.0	(4) 10.0
2	(2) 1.25	(4) 0.35	(1) 8.0	(3) 9.0
3	(3) 1.35	(1) 0.20	(4) 11.0	(2) 8.0
4	(4) 1.45	(3) 0.30	(2) 9.0	(1) 7.0
5	(5) 1.55	(5) 0.40	(5) 12.0	(5) 11.0

表 10-45 用均匀设计构成初始单纯形的结果及其推进

实验号 (顶点)	保留顶点	空气压力 (大气压)	乙炔压力 (大气压)	燃器高度 (m m)	灯电流 (m A)	吸光度	吸收系数 ( $\times 10^{-2}$ )	最坏点	标准差 ( $\times 10^{-2}$ )	注
1		1.15	0.25	10.0	10.0	0.106	2.21		0.19	扩大 出界 整体 收缩 反射 收缩
2		1.25	0.35	8.0	9.0	0.109	2.06		0.16	
3		1.35	0.20	11.0	8.0	0.099	1.84		0.10	
4		1.45	0.30	9.0	7.0	0.118	2.18		0.16	
5		1.55	0.40	12.0	11.0	0.098	1.75	5	0.13	
6	1, 2, 3, 4	1.05	0.15	7.0	6.0	0.112	2.49	3	0.19	
7	1, 2, 3, 4	1.92	0.92	5.7	4.8					
8	1, 3, 4, 6	1.10	0.32	6.0	8.0	0.065	1.44	7	0.18	
9	向 6 点收缩	1.17	0.21	10.0	7.2	0.113	2.36	2	0.19	
10	1, 4, 6, 8	1.16	0.10	10.0	6.1	0.101	2.10	9	0.03	
11	1, 4, 6, 9	1.18	0.17	9.5	6.8	0.110	2.31	4	0.26	

例 3 用单纯形法找出测定铂、钯、金的最佳测定条件

仪器：610-S (日本) 空气流量为 8 升 / 分。测定波长 Pt2659 , Pd2448 , Au2428 。狭缝宽为 1.9 。表 10-16 列出了单纯形测铂、钯、金的因素, 初始水平, 步长和上下限。表 10-17 为铂的单纯形进程。

表 10-16 因素、界限、初始水平和步长

界限和初始水平 因素	Pt					Pd				Au		
	下 限	初始 水平	步 长	上 界	下 界	初始 水平	步 长	上 界	下 界	初始 水平	步 长	上 界
燃器高度 (mm)	1	3	2	13	1	3	2	13	1	3	2	13
灯电流 (mA)	4	8	4	20	4	8	4	20	4	8	2	20
乙炔流量 (l/min)	0.5	1	1	2	0.5	0.5	1	2	0.5	0.5	0.5	2
进样速度 (ml/min)	5	5	3	8	5	7	3	8	5	7	2	

表 10-17 铂的单纯形进程

点号	顶点, 重心 (或反射点, 扩张点, 压缩点等)	组成单纯形的顶点	燃烧器高 (mm)	灯电流 (mA)	乙炔流量 (L / min)	进样速率 (mL / min)	平均吸收值 A	实验编号
1	顶点	1, 2, 3, 4, 5	3	8	1	5	18.8	1
2	顶点	同上	3	4	1	5	25.0	2
3	顶点	同上	5	8	1	5	22.5	3
4	顶点	同上	3	8	2	5	6.0	4
5	顶点	同上	3	8	1	8	40.3	5
6	重心	同上	3.75	6.5	1	5.75		
	反射点	同上	4	6	0.5	6.5	37.5	6
	重心	1, 2, 3, 5, 6	3.75	6.5	0.875	6.13		
7	反射点	同上	4	6	0.5	7.26	42.8	7
8	扩张点	同上	4	4	0.5	8.0	44	8
9	重心	2, 3, 5, 6, 8	3.5	5.5	0.75	6.87		
	反射点	同上	4	4	0.5	8.0		
	压缩点	同上	4	6	0.5	8.0	43.3	9
10	重心	2, 5, 6, 8, 10	3.75	6	0.63	7.63		
	反射点	同上	5	8	0.5	8.0	41.5	10
	重心	5, 6, 8, 10, 11	4	6.5	0.625	8.0		
12	反射点	同上	4	6	0.75	8.0	42.5	11
13	重心	5, 8, 10, 11, 12	4.25	6	0.56	8.0		
	反射点	同上	6	5	0.5	8.0	42.3	12
	重心	8, 10, 11, 12, 13	4.5	5	0.56	8.0		
14	反射点	同上	4	4	0.5	8.0	44	13
15	缩小点		5	4	0.5	8.0	42.8	14



(4) 单纯形法与正交试验设计法比较

为了比较两种方法选出的最佳条件，用试验进行验证，实验结果列于表10-19

表 10-19 单纯形法与正交试验设计法找出的最佳条件的比较

方法	检测元素 吸收值	P t		P d		A u	
		实验次数	吸收值	实验次数	吸收值	实验次数	吸收值
正交试验设计		16	40	16	39.0	16	43
单纯形法		15	42.8	13	42.5	13	46.3

从表 10-19 的数据看出，单纯形法找出的最佳操作条件的实验次数普遍比正交试验设计法实验次数略少，所得最佳条件比正交法均有改善。实际上正交法的点中大多数都是效果很差的，虽然找到了某个点效果较好，但在该点邻近往往没有较好的点可以参照对比，相反单纯形法的点大多数是效果较好，所以一旦最后确定了某个最佳点参数，同时也可掌握在该点邻近区域内效果变化的情况，从而对最佳条件允许波动范围有所了解。

## 结 论

1. 单纯形法在寻找最佳分析条件时是一种有用的工具,它具有简单、可靠、准确等优点,因此值得在分析化学中推荐使用。
2. 与正交设计法相比,它在相同的实验次数下,单纯形法所找到的分析条件具有更好效果。
3. 单纯形法所找到的最佳条件不是某个孤立的点,而是一个最佳条件范围,从而可了解最佳条件的稳定区域。
4. 单纯形法的每一步都可用数学公式描述,这些公式既可用手工计算,也可与微型计算机联机进行控制,从而为今后进一步全自动寻找最佳分析条件创造了条件

## 3.7 试验设计方法的综合应用

### 1、试验设计方法分类

(1) 从如何处理多因素问题的角度出发可分为：

① 单因素试验法，②多因素组合试验法。

(2) 从如何处理多水平问题的角度分：

① 同时试验法：在试验前将所有可能的试验条件一次确定下来，整个试验一次完成，并取得最终试验结果。

② 序贯试验法：整个试验分批进行，根据前批试验提供的信息，再按各种录优原则重新确定后面的试验方向、试验范围和试验精度，并安排下一批试验，直到找到最优的试验条件。

## 2、试验设计方法的综合应用

试验设计主要运用在预先试验、条件优化试验及特定条件进行的试验。

### (1) 预先试验的试验设计

对试验条件进行初步考查，了解各因素对试验指标的影响程度，为后续深入细致的研究提供依据。

预先试验设计应尽量多选择因素、扩大试验范围、多选择水平。

常用方法：均匀试验设计（可考察因素多、水平多），正交试验设计（一般不考察交互作用），多因素逐项试验设计（单因素试验法，均分法）。



## (2) 条件优化试验设计

条件优化试验设计方法一般采用正交试验设计法、均匀试验设计法以及单纯形调优法。对于正交试验设计法由于所选取的水平相对较少，所以通常需要先进行预先试验，以确定合理的试验范围。

## (3) 试验设计方法的灵活应用

交互作用的考查要慎重，一方面不应对所有的交互作用都进行考查，另一方面，对不明确的交互作用可以预先用较少的试验进行预先判断，也可以将交互作用列空下来看作误差，根据试验结果进行判断。

分割试验设计法在实际需要中应注意加以采用。

### (4) 试验设计方法选取原则

- 需要考察交互作用时，采用多因素组合试验法；
- 试验周期长，而产品检验周期短时，采用序贯试验法；
- 试验周期短，而产品检验周期长时，采用同时试验法；
- 费用大的试验采用分割试验法、序贯试验法等。