

7
附赠网上电子教案

优化试验设计 方法及数据分析

何为 薛卫东 唐斌 主编



化学工业出版社

电子科技大学“十二五”规划研究生教材

优化试验设计方法及数据分析

何 为 薛卫东 唐 斌 主编



化学工业出版社

· 北京 ·

本书介绍了目前在国内外最常用、最有效的几种优化试验设计与数据分析的基本原理及其在化学、材料、机械、电子、质量管理等众多领域中的应用。内容包括正交试验法、优选法基础、因子设计法、一元和回归分析方法、正交多项式回归、均匀设计法、单纯形优化法、三次设计、稳定性设计、响应曲面试验设计及应用分析软件在数据分析中的应用等。着重介绍方法的原理、应用范围、优缺点以及如何将这些方法应用到科研和生产实际中，如何运用优化试验设计方法设计解决科研和生产实际问题的试验方案、如何设置试验参数，如何分析试验数据、如何估计试验误差、如何对试验的结果进行评价。

本书可作为高等院校高年级学生及研究生的教材，对从事科研和生产的科研人员及工程技术人员也是一部好的参考书。

图书在版编目 (CIP) 数据

优化试验设计方法及数据分析/何为, 薛卫东, 唐斌
主编. —北京: 化学工业出版社, 2012. 2
电子科技大学“十二五”规划研究生教材
ISBN 978-7-122-13177-5

I. 优… II. ①何… ②薛… ③唐… III. ①试验设计-
教材②统计分析-教材 IV. 0212

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2011) 第 280537 号

责任编辑: 吴刚
责任校对: 蒋宇

文字编辑: 孙凤英
装帧设计: 张辉

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 装: 三河市延风印装厂

787mm×1092mm 1/16 印张 23 字数 617 千字 2012 年 3 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: 49.00 元

版权所有 违者必究

前 言

优化试验设计方法是自然科学研究方法论领域中的一个分支学科，它是一项通用技术，主要应用于提高试验效率、优化产品设计、改进工艺技术、强化质量管理等方面，是国内外许多重点大学的化学、化工、电子、机械、材料、生物、医学、农学及管理类专业专业的专业技术基础课程，是当代科学技术和工程技术人员必须掌握的技术方法。

试验设计技术最早是由英国人费歇尔（R. A. Fisher）等人带头发展起来的，并首先应用在农业田间试验中。第二次世界大战后，其基本技术被引进到日本，发展为质量管理的主要方法之一。以田口玄一教授为首的一批研究工作者，开发了各种正交表的应用技巧和分析方法，使费歇尔用于农业试验的方法获得了改造和刷新。新的正交试验设计技术由于具有试验结果重复性好、可靠性高、适用面宽、试验次数少、配置容易、分析简便等优点而得到普及，成为质量管理的重要工具。

我国在此领域起步较晚，由我国著名数学家华罗庚教授于 20 世纪 70 年代初，向全国推广应用优化试验设计方法的一个分支——优选法。在此之前，此方法虽然也在生产上应用，但并没有引起广泛的重视。到了 20 世纪 70 年代中期，优选法已在全国各行各业取得了巨大的成果，效果十分显著，多用在化工、电子、材料、建工、建材、石油、冶金、机械、交通、电力、水利、纺织、医疗卫生、轻工、食品等方面。不仅如此，问题的类型也在逐渐增多，有配方配比的选择，生产工艺条件的选择，工程设计参数的确定，仪器、仪表的调试以及近似计算等。

随着优选法的应用范围不断扩大，优选法的理论及方法必将日趋完善。而近期发展起来的优化试验设计方法如正交试验法、回归分析法、正交多项式回归法、均匀设计法、单纯形法等，应用范围更加广泛，更为有效，本书对这些方法都将做详尽的论述。

本书作者从 1989 年起编写了《优化试验设计方法》（约 30 万字）讲义，用于大学化学及材料专业高年级学生及研究生的教材；1994 年，由何为主编，电子科技大学出版社出版了《优化实验设计法及其在化学中的应用》（32 万字）一书；2004 年，何为教授再版了《优化实验设计法及其在化学中的应用》（共 62 万字），第二版中补充了已在发达国家成功使用的新的试验设计方法——因子设计方法、三次设计法、稳定性设计和可靠性设计法等内容。

本教材编写的宗旨是保持并发扬原有特色，面向 21 世纪写出具有改革创新、贴近科研和生产实际的、有实用价值的教材。全书共分 14 章，即在原教材《优化试验设计法及其在化学中的应用》第二版的基础上，增加了“响应曲面试验设计”和“试验设计与数据分析中的软件应用”两章，删除了“鲍威尔优化法及应用”一章，并对全书内容进行了修改与更新，补充编者在科学研究中，应用优化试验设计方法取得科研成果的成功案例，力求保持教材的科学性、先进性和实用性。为了便于教学，每章增加了内容摘要和习题，还提供了与本书配套的多媒体教学课件，从客观上保证了教学质量。

本书第1、2、3、9、10章由何为教授编写，第6、7、8章由薛卫东教授编写，第4、5、11、14章由唐斌副教授编写，第12、13章及附录由周国云博士编写。全书由何为教授、薛卫东教授修改、整理定稿。重庆大学张胜涛教授对全书进行了审定，在此深表谢意。

在编写本书的过程中，参考了国内外的书籍和资料（主要书目列于书末的参考文献），引用了其中的一些内容和实例，在此对所有的作者表示诚挚的感谢。

对于书中存在的错误和不妥之处，恳请读者提出宝贵意见。

编 者

目 录

第1章 正交试验基本方法	1	3.3 活动水平与组合因素法	81
1.1 问题的提出——多因素的试验问题	1	3.3.1 活动水平法	81
1.2 用正交表安排试验	3	3.3.2 组合因素法	83
1.2.1 指标、因素和水平	3	3.4 分割试验法	84
1.2.2 正交表符号的意义	3	3.5 部分追加法试验设计	91
1.2.3 正交表的正交性	4	习题	93
1.2.4 用正交表安排试验	5	第4章 $L_r^m(t^q)$ 型正交表的构造	95
1.3 正交试验的结果分析——极差分析法	7	4.1 概述	95
1.4 有交互作用的正交试验	17	4.2 二水平正交表的构造	96
1.4.1 交互作用	17	4.2.1 二水平运算法则	96
1.4.2 关于自由度和正交表的 选用原则	17	4.2.2 正交表与交互作用列表的构造	96
1.4.3 有交互作用的正交试验及 结果分析	18	4.3 三水平正交表的构造	99
习题	28	4.3.1 三水平运算规则	99
第2章 正交试验结果的统计分析法—— 方差分析法	29	4.3.2 正交表与交互作用列表的构造	99
2.1 试验数据构造模型	29	4.4 $L_r^m(t^q)$ 型表的一般构造方法	102
2.1.1 单因素试验方差分析的数学模型	29	4.4.1 t 水平的运算	102
2.1.2 正交试验方差分析的数学模型	34	4.4.2 正交表与交互作用列表的构造	102
2.2 正交试验的方差分析法	35	习题	102
2.2.1 方差分析的必要性	35	第5章 2^k 和 3^k 因子设计	103
2.2.2 单因素方差分析法	36	5.1 因子设计的一般概念	103
2.2.3 正交试验的方差分析	41	5.2 2^k 因子设计	104
2.3 有重复试验的方差分析	49	5.2.1 2^2 设计	105
2.4 缺失数据的弥补	57	5.2.2 2^3 设计	108
2.4.1 试验有重复的情况	57	5.2.3 一般的 2^k 设计	114
2.4.2 一种处理的数据完全 缺失的情况	57	5.2.4 2^k 设计的单次重复	115
习题	60	5.3 3^k 因子设计	119
第3章 多指标问题及正交表在试验 设计中的灵活运用	62	5.3.1 3^2 设计	119
3.1 多指标问题的处理方法	62	5.3.2 3^3 设计	121
3.1.1 综合评分法	62	5.3.3 一般的 3^k 设计	124
3.1.2 综合平衡法	64	习题	125
3.2 水平数不同的正交表的使用	70	第6章 优选法基础	127
3.2.1 直接套用混合正交表	70	6.1 概述	127
3.2.2 并列法	73	6.1.1 优选法的基本步骤	128
3.2.3 拟水平法	78	6.1.2 优选法的分类	129
3.2.4 混合水平有交互作用的正交设计	80	6.2 单因素优选法	129
		6.2.1 平分法	129
		6.2.2 黄金分割法(0.618)	131
		6.2.3 分数法	135
		6.3 多因素方法——降维法	137
		6.3.1 等高线法	137

6.3.2	纵横对折法	139	10.5	控制加权形心法	214
6.3.3	平行线法	142	10.6	单纯形优化的参数选择	214
	习题	144	10.6.1	试验指标	214
第7章	回归分析方法	146	10.6.2	初始单纯形的构成	215
7.1	一元线性回归	146	10.6.3	单纯形的收敛	216
7.1.1	回归分析法概述	146		习题	216
7.1.2	一元线性回归方程的确定	147	第11章	响应曲面试验设计	218
7.1.3	预报和控制	151	11.1	响应曲面法的基本原理	218
7.1.4	应用举例	153	11.2	一阶响应曲面设计方法	220
7.1.5	化非线性回归为线性回归	155	11.2.1	自然变量到规范变量的编码变换	220
7.2	多元回归分析方法	156	11.2.2	一阶响应曲面的正交设计	221
	习题	162	11.2.3	最速上升法	231
第8章	正交多项式回归设计	164	11.3	二次响应曲面的设计与分析	237
8.1	概述	164	11.3.1	二阶响应曲面的中心 复合设计	237
8.2	正交多项式回归	164	11.3.2	二阶响应曲面的 Box-Behnken 设计	243
8.3	正交多项式回归设计和回归 方程的建立	170	11.4	基于多元正交多项式的响应 曲面设计	245
8.3.1	回归方程的建立	170		习题	249
8.3.2	最优回归	174	第12章	三次设计	251
8.3.3	回归方程的精度	176	12.1	三次设计概述	251
8.3.4	考虑交互效应的正交多项式 回归	176	12.1.1	三次设计的定义	251
8.4	正交拉丁多元回归设计	181	12.1.2	系统设计概述	251
8.4.1	拉丁方与正交拉丁方	181	12.1.3	参数设计概述	252
8.4.2	正交拉丁方试验与正交表 设计试验	183	12.1.4	容差设计概述	252
8.4.3	正交拉丁方试验的分析	184	12.2	质量损失函数及容差设计	253
8.4.4	正交拉丁方多元回归设计	184	12.2.1	成本相同的假定	253
	习题	189	12.2.2	质量损失函数及其近似表达式	253
第9章	均匀设计法	191	12.2.3	机能界限与出厂公差	254
9.1	正交设计与均匀设计	191	12.2.4	容差设计	255
9.2	均匀设计表	194	12.3	依信噪 SN 比直接择优	257
9.2.1	等水平均匀设计表	194	12.3.1	望小特性质量损失函数及 SN 比	258
9.2.2	混合水平均匀设计表	197	12.3.2	望大特性质量损失函数及 SN 比	260
9.3	均匀设计基本步骤	200	12.4	依偏差均方直接择优	263
9.4	试验结果的回归分析法	201	12.4.1	并联反馈偏置电路介绍	263
	习题	203	12.4.2	并联反馈偏置电路的系统设计	264
第10章	单纯形优化法	204	12.4.3	参数择优设计	265
10.1	概述	204		习题	269
10.2	基本单纯形	204	第13章	稳定性择优设计	271
10.2.1	双因素基本单纯形法	204	13.1	稳定性择优的基础知识	271
10.2.2	新试验点的计算方法	206	13.1.1	内干扰、外干扰和误差波动	271
10.2.3	多因素基本单纯形法	206	13.1.2	稳定性择优概述	271
10.2.4	p 、 g 的计算	207	13.1.3	稳定性评价指标	273
10.2.5	小结	208	13.1.4	容差设计和调整系统偏差中用 到的公式	274
10.2.6	特殊方法	208	13.2	依偏差均方的稳定性择优设计	276
10.3	改进单纯形法	212	13.2.1	系统设计	276
10.4	加权形心法	213			

13.2.2	参数设计	276	14.5	Minitab 在试验设计数据分析中的应用	313
13.2.3	容差设计	280	14.5.1	有交互作用的正交试验的方差分析	314
13.2.4	其他	281	14.5.2	均匀设计法的多元非线性回归分析	317
13.3	依信噪 SN 比的稳定性择优设计	284	习题		322
13.3.1	系统设计——问题的提出	284	附录		324
13.3.2	参数设计	284	附录 1	常用正交表	324
13.3.3	容差设计	289	附录 2	标准正态分布表	342
习题		293	附录 3	F 分布表	343
第 14 章	试验设计与数据分析中的软件应用	294	附录 4	t 分布表	346
14.1	正交助手在正交设计统计分析中的应用	294	附录 5	均匀设计表	347
14.2	DPS 在优化试验设计方法中的应用	299	附录 6	正交多项式表	350
14.3	SPSS 在均匀试验设计统计分析中的应用	302	参考文献		356
14.4	Design-Expert 在响应曲面设计中的应用	306			

第 1 章 正交试验基本方法

正交试验法是利用数理统计学与正交性原理进行合理安排试验的一种科学方法。本章主要介绍了正交试验设计的基本思想、对多因素试验问题如何用正交表安排试验、如何用极差分析法对试验数据进行比较分析,以及有交互作用的正交试验的表头设计和结果分析,并通过实例说明了引入正交试验方法的必要性和重要性。

1.1 问题的提出——多因素的试验问题

在生产和科研实践中,为了改革旧工艺或试制新产品,经常要做许多多因素试验,如何安排多因素试验,是一个很值得研究的问题。试验安排得好,既可减少试验次数、缩短时间和避免盲目性,又能得到好的结果。试验安排得不好,试验次数增多,结果还不一定满意。“正交试验法”是研究与处理多因素试验的一种科学方法。它是在实际经验与理论认识的基础上,利用一种排列整齐的规格化表——“正交表”来安排试验。由于正交表具有“均衡分散,整齐可比”的特点,能在考察的范围内,选出代表性强的少数试验条件做到均衡抽样。由于是均衡抽样,能够通过少数的试验次数,找到最好的生产和科研条件,即最优的方案。

为什么正交试验可用较少的试验次数获得最优方案呢?下面以一个三因素三水平试验为例来加以说明。

【例 1-1】 为提高某化工产品的转化率,选择了三个有关的因素进行条件试验、反应温度(A),反应时间(B),用碱量(C),并确定了它们的试验范围。

A: 80~90℃

B: 90~150min

C: 5%~7%

试验的目的是搞清楚因素 A、B、C 对转化率有什么影响,哪些是主要的因素,哪些是次要的因素,从而确定最优生产条件,即温度、时间及用碱量各为多少才能获得高转化率,试制定试验方案。

这里,对因素 A,在试验范围内选了三个水平;因素 B 和因素 C 也都取了三个水平。

A: $A_1=80^\circ\text{C}$ 、 $A_2=85^\circ\text{C}$ 、 $A_3=90^\circ\text{C}$

B: $B_1=90\text{min}$ 、 $B_2=120\text{min}$ 、 $B_3=150\text{min}$

C: $C_1=5\%$ 、 $C_2=6\%$ 、 $C_3=7\%$

当然,在正交试验设计中,因素可以是定量的,也可以是定性的。而定量因素各水平间的距离可以相等,也可以不相等。

(1) 全面试验法 取三因素三水平之间的条件试验,通常有两种试验进行的方法。

$A_1 B_1 C_1$ $A_2 B_1 C_1$ $A_3 B_1 C_1$

$A_1 B_1 C_2$ $A_2 B_1 C_2$ $A_3 B_1 C_2$

$A_1 B_1 C_3$ $A_2 B_1 C_3$ $A_3 B_1 C_3$

$A_1 B_2 C_1$ $A_2 B_2 C_1$ $A_3 B_2 C_1$

$A_1 B_2 C_2$ $A_2 B_2 C_2$ $A_3 B_2 C_2$

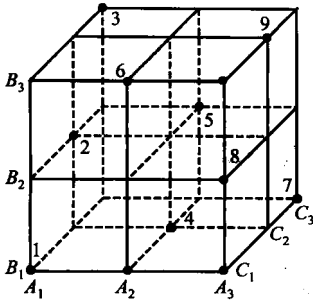


图 1-1 三种试验安排方法

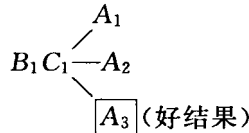
$A_1 B_2 C_3$ $A_2 B_2 C_3$ $A_3 B_2 C_3$
 $A_1 B_3 C_1$ $A_2 B_3 C_1$ $A_3 B_3 C_1$
 $A_1 B_3 C_2$ $A_2 B_3 C_2$ $A_3 B_3 C_2$
 $A_1 B_3 C_3$ $A_2 B_3 C_3$ $A_3 B_3 C_3$

共有 $3^3 = 27$ 次试验。

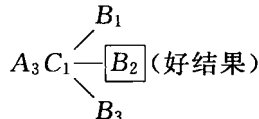
用图 1-1 立方体 27 个节点表示该 27 次试验，这种试验法叫全面试验法。图中 27 个交叉点为全面试验时试验的分布位置；其中，每一条线上交点“·”为简单比较法安排试验点的分布位置；“·”点为正交试验法安排试验时试验点的分布位置。

全面试验法对各因素与试验指标之间的关系剖析得比较清楚，但试验次数太多，费时、费事。例如，我们还需要对试验的重现性，对试验的误差大小做出估计，则每一个试验至少要重复一次，即应做 54 次试验。特别是当因素多，每个因素的水平数目也多时，试验量大得惊人。如选六个因素，每个因素取五个水平时，则全面试验的数目是 $5^6 = 15625$ 次，这里还未包括为了给出误差估计所需重复的试验次数，显然这实际上是不可能实现的。如果应用正交试验法，只做 25 次试验就行了。而且从某种意义上讲，这 25 次试验就代表了 15625 次试验。

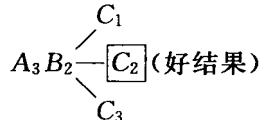
(2) 简单比较法 即变化一个因素而固定其他因素，如首先固定 B 、 C 于 B_1 、 C_1 ，使 A 变化，则：



如得出结果 A_3 最好，则固定 A 于 A_3 ， C 还是 C_1 ，使 B 变化，则：



得出结果 B_2 最好，则固定 B 于 B_2 ， A 于 A_3 ，使 C 变化，则：



试验结果以 C_2 最好。于是就认为最好的工艺条件是 $A_3 B_2 C_2$ 。

这种方法一般也很有效果，但缺点很多，首先这种方法的选点代表性很差，如按上法进行试验，试验点完全分布在一个角上（如图 1-1 所示），而在一个很大的范围内没有选点。因此，这种试验方法不全面，所选的工艺条件 $A_3 B_2 C_2$ 不一定是组合中最好的。而且当各因素之间存在交互作用时，采用不同的因素轮换方式，最后的结论是不同的。

用简单比较法的缺点如下。

第一，无法考察因素间的交互作用，而事实上这种效应却是经常存在的。

第二，如果不进行重复试验，试验误差就估计不出来。

第三，用这种方法安排试验，同样的试验次数，提供的信息不够丰富。

简单比较法的最大优点就是试验次数少。例如，对六个因素五水平试验，在不重复时，

只做 $5 + (6-1) \times (5-1) = 5 + 5 \times 4 = 25$ 次试验就可以了。

考虑兼顾这两种方法的优点，全面试验点在试验范围内分布得很均匀，能反映全面试验的情况。但我们又希望试验点尽量得少，为此还要具体考虑一些问题。

如上例中，对应于 A 有 A_1 、 A_2 、 A_3 三个平面，对应于 B 、 C 也各有三个平面，共九个平面。则这九个平面上的试验点都应当一样多，即对每个因素的每个水平都要等同看待。具体来说，每个平面上都有三行、三列，要求在每行、每列上的点一样多。这样做出如图 1-1 所示的设计，试验点用“0”表示。我们看到，在 9 个平面中每个平面上都恰好有三个点，而每个平面的每行、每列都有一个点，而且只有一个点，总共九个点。这样的试验方案，试验点分布很均匀，试验次数也不多。

当因素数和水平数都不太多时，尚可通过做图的办法来选择分布很均匀的试验点，但是因素数和水平数多了，做图的方法就不行了。

试验工作者在长期的工作中总结出一套办法，创造出所谓的正交表。按照正交表来安排试验，既能使试验点分布得很均匀，又能减少试验次数，而且计算分析简单，能够清晰地阐明试验条件与试验指标之间的关系。该方法对于全体因素来说是一种部分试验（即做了全面试验中的一部分），但对其中任何两个因素却是具有等量重复的全面试验。

这种用正交表来安排试验及分析试验结果的方法叫做正交试验法。它是利用数理统计学和正交性原理，从大量试验点中选取适量的具有代表性的试验点，应用正交表合理安排试验的科学方法。经验表明，试验中的最好点，虽然不一定是全面试验中的最好点，但也往往是相当好的点。特别是如果其中只有一两个因素起主要作用，而试验之前又不确切知道是哪一两个因素起主要作用，用正交试验法能保证主要因素的各种可能搭配都不会漏掉。试验点在优选区的均衡分布，在数学上叫正交，这就是正交试验法中“正交”两字的由来。

1.2 用正交表安排试验

1.2.1 指标、因素和水平

试验需要考虑的结果称为试验指标（简称指标），如产品的性能、质量、成本、产量等均可作为衡量试验效果的指标。在【例 1-1】中的转化率即为该试验的试验指标，可以直接用数量表示的叫定量指标，不能用数量表示的指标叫定性指标。对于定性指标，可以按评定结果打出分或评出等级，就可以用数量表示了。这便是定性指标的定量化。在正交试验法中，为了便于分析试验结果，凡遇到定性指标总是把它加以定量化处理。因此，以后我们对两者就不再加以区别了。

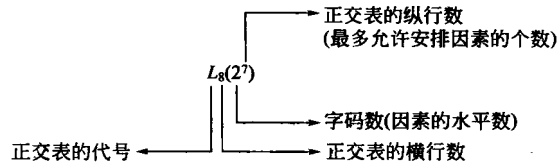
把在试验中要考虑的对试验指标可能有影响的变量简称为因素，用大写字母 A 、 B 、 C 、 \dots 表示，它是对试验指标可能有影响的对比条件。每个因素可能处的状态称为因素的水平（简称水平），某个因素在试验中需要考虑它的几种状态或几个具体条件，就是几水平的因素。在【例 1-1】中，因素为温度（ A ）、时间（ B ）、碱用量（ C ）。 $A_1 = 80^\circ\text{C}$ ， $A_2 = 85^\circ\text{C}$ ， $A_3 = 90^\circ\text{C}$ 为因素（ A ）所取的水平，对（ B ）、（ C ）也同样。这里应该明确，正交试验法仅适用于试验中能人为地加以控制的调节因素——可控因素。

1.2.2 正交表符号的意义

每张正交表通常都有各自的记号， $L_8(2^7)$ 、 $L_{16}(2^{15})$ 、 $L_9(3^4)$ 、 $L_{16}(4^2 \times 2^9)$ 、 $L_{18}(6^1 \times 3^6)$ 等。符号 L 代表正交表， L 右下角的数字 8、16、9、18 等表示需做的试验次数；括号内的指数的数字 7、15、4 等表示最多允许安排的条件因素的个数，括号内的数字 2、3、4 等表示因素的水平数。如 $L_8(2^7)$ 表示要做 8 个试验，每个因素取两个水平，最多允许安排

7 个因素； $L_{16}(4^2 \times 2^9)$ 表示做 16 个试验，其中最多允许安排两个四水平的因素和 9 个二水平的因素。

正交表的记号所表示的意义可归纳如下：



1.2.3 正交表的正交性

下面以两张最简单的正交表 $L_8(2^7)$ 、 $L_9(3^4)$ (如表 1-1、表 1-2 所示) 介绍正交表的正交性。

表 1-1 $L_8(2^7)$ 正交表

列号 试验号	1	2	3	4	5	6	7
1	1	1	1	1	1	1	1
2	1	1	1	2	2	2	2
3	1	2	2	1	1	2	2
4	1	2	2	2	2	1	1
5	2	1	2	1	2	1	2
6	2	1	2	2	1	2	1
7	2	2	1	1	2	2	1
8	2	2	1	2	1	1	2

表 1-2 $L_9(3^4)$ 正交表

列号 试验号	1	2	3	4
1	1	1	1	1
2	1	2	2	2
3	1	3	3	3
4	2	1	2	3
5	2	2	3	1
6	2	3	1	2
7	3	1	3	2
8	3	2	1	3
9	3	3	2	1

正交表 $L_8(2^7)$ 有 8 个横行，7 个直列，由字码“1”和“2”组成，它有两个特点。

(1) 每个直列恰好有四个“1”和四个“2”。

(2) 任意两个直列，其横方向形成的八个数字对中，恰好 (1, 1)、(1, 2)、(2, 1) 和 (2, 2) 各出现两次。就是说对于任意两个直列，字码“1”和“2”间的搭配是均衡的。

正交表 $L_9(3^4)$ 有 9 个横行，4 个直列，由字码“1”、“2”和“3”组成，它有两个特点。

(1) 每个直列中，“1”、“2”和“3”出现的次数相同，都是三次。

(2) 任意两个直列，其横方向形成的九个数字对中，(1, 1)、(1, 2)、(1, 3)、(2, 1)、(2, 2)、(2, 3)、(3, 1)、(3, 2)、(3, 3) 出现的次数相同，都是一次；即任意两

列字码“1”、“2”和“3”间的搭配是均衡的。

这两个特点称为正交性。每张正交表都具有正交性。因此用正交表安排试验，具有均衡分散、整齐可比的特征，代表性强，效率高，这是因为正交试验法对全体因素来说是部分试验，但对其中任意两个因素来说是具有相同重复次数的全面的试验。

现在简单说明一下正交表的整齐可比性。

若用 $L_9(3^4)$ 安排试验，从表 1-2 知，各因素水平的变化很有规律，按一定规律变化，各因素出现的次数相同。因此，其他各因素对试验结果的影响基本相同或相近，最大限度地排除了其他因素的干扰，突出了主要因素的效应，这样便于比较因素各水平的效应。由于因素之间搭配均衡，使得由于非均衡分散性而可能形成的误差从平均值中消除了。因此，只要简单地比较因素各水平试验指标的平均值，就可估计各因素效应的大小。因此各水平在试验中变化有规律，试验结果用平均值就能方便地进行比较的特性称为整齐可比性，它是正交试验结果分析的基础，以后还会详细地加以说明。

1.2.4 用正交表安排试验

下面以【例 1-1】为例来说明具体做法。

首先应明确试验的目的，确定试验指标。在【例 1-1】中，试验目的是搞清因素 A、B、C 对转化率有何影响，试验指标为转化率。

其次确定因素-水平表，通过矛盾分析及生产经验，决定本试验需考察反应温度 (A)、反应时间 (B)、用碱量 (C) 三种因素，并确定了试验范围，对因素 A、B、C 分别在试验范围内各选了三个水平，因素-水平表见表 1-3。

表 1-3 因素-水平表

因素 水平	A	B	C	因素 水平	A	B	C
	温度/℃	时间/min	用碱量/%		A	B	C
1	80	90	5	1	A ₁	B ₁	C ₁
2	85	120	6	2	A ₂	B ₂	C ₂
3	90	150	7	3	A ₃	B ₃	C ₃

然后确定试验方案，选用合适正交表 $L_9(3^4)$ 可安排 4 因素 3 水平试验，本试验可选用之。

按照因素顺序上列，水平对号入座，确定试验方案。本试验仅三个因素可排在 $L_9(3^4)$ 表的 1、2、3 列，在三种因素排好后，按因素水平所确定的关系对号入座。试验方案如表 1-4 所示。

表 1-4 试验方案及试验结果表

列号 试验号	A	B	C	4	试验指标 转化率/%
	温度/℃	时间/min	用碱量/%		
	1	2	3		
1	1(80℃)	1(90min)	1(5%)	1	31
2	1(80℃)	2(120min)	2(6%)	2	54
3	1(80℃)	3(150min)	3(7%)	3	38
4	2(85℃)	1	2	3	53
5	2(85℃)	2	3	1	49
6	2(85℃)	3	1	2	42
7	3(90℃)	1	3	2	57
8	3(90℃)	2	1	3	62
9	3(90℃)	3	2	1	64

在实施试验时，“横着做”。

具体 9 次试验如下：

$A_1B_1C_1$ $A_1B_2C_2$ $A_1B_3C_3$
 $A_2B_1C_2$ $A_2B_2C_3$ $A_2B_3C_1$
 $A_3B_1C_3$ $A_3B_2C_1$ $A_3B_3C_2$

最后进行结果分析（后面会讲到，具体可见 1.3 正交试验的结果分析——极差分析法和 1.4.3 有交互作用的正交试验及结果分析内容）。

由上例可得出用正交表安排试验步骤如下。

(1) 明确试验目的，确定考察指标。

(2) 挑因素、选水平，制定因素-水平表，选择合适的正交表，确定试验方案。试验目的就是通过这些正交试验要想解决什么问题。

下面对正交表的使用再做几点说明。

(1) 试验设计 上面【例 1-1】中试验设计未考虑因素之间的交互作用，故选用 $L_9(3^4)$ 表较为合适，三因素所处的列可任意选择，而且也可将因素的次序交换。如在 1、2、3 列可依次排列 A、B、C 三因素，也可排 A、C、B 三因素。再把需要试验的各因素的水平安排入正交表内一定列后便得到一张试验设计表，此过程叫做表头设计。

(2) 试验顺序 $L_9(3^4)$ 表说明了应做试验的次序，但进行试验时不一定按表上的号码排列，而是用抽签等办法来决定。这样做的目的是减少试验中由于先后不均匀带来的误差干扰。但对有些试验，其次序却不宜随便变更。

(3) 因素水平随机化 每个因素的水平并不一定总是由小到大（或由大到小）顺序排列。按正交表安排试验，必有一次所有的“1”水平相碰在一起，而这种极端的情况有时是不希望出现的，或者说有时它没有多大的实际意义。那么究竟如何安排水平才更为妥当呢，常用的一种方法叫随机化，即对部分因素水平做随机化排列。如果我们希望某一特殊水平的组合出现时，水平的排列不随机化也是可以的。

(4) 根据试验要求选用 L 表 选择正交表除考虑因素水平外，还与试验对精度的要求有关。若试验精度要求高，可取试验次数多的 L 表；试验精度要求不高的，可取试验次数少的 L 表；当分析的交互作用多，宜选用大的 L 表，以避免出现混杂；已知交互作用少的，则选小的 L 表。

【例 1-2】 在化学分析中，要考虑发色温度、试剂甲的用量、萃取溶剂体积、发色时间和试剂乙的用量这五个因素对试验指标 y 的影响， y 越大越好，希望找到最适合工艺条件。

根据专业知识选择如下因素水平。

在不考虑因素间交互作用时，将这五个因素任意地安排在 $L_8(2^7)$ 的五列上，然后将表中的数字翻译成该列因素的具体水平就构成了试验方案。因素-水平表如表 1-5 所示，试验方案表如表 1-6 所示。

表 1-5 $L_8(2^7)$ 因素-水平表

因素 水平	A	B	C	D	E
1	5	2	25	2	0.5
2	8	3	15	1	1

表 1-6 试验方案表

因素 试验号	A 萃取溶剂体积 /mL	B 试剂甲用量 /mL	C 发色温度 /℃	D 试剂乙用量 /mL	E 发色时间 /h
1	1(5)	1(2)	1(25)	1(2)	1(0.5)
2	1	1	2(15)	2(1)	2(1)
3	1	2(3)	1	1	2
4	1	2	2	2	1
5	2(8)	1	1	2	1
6	2	1	2	1	2
7	2	2	1	2	2
8	2	2	2	1	1

1.3 正交试验的结果分析——极差分析法

上节介绍了如何用正交表安排试验，在试验完成后，如何对得到的试验数据（指标）进行科学的分析，从而得出正确的结论，这是试验设计的重要步骤。下面便以【例 1-1】为例介绍一种直观分析法——极差分析法。

我们对表 1-4 的试验结果进行综合比较，在比较中要鉴别的内容如下。

- ① 在 3 个因素中，哪些因素对收率影响大，哪些因素影响小。
- ② 如果某个因素对试验数据的影响大，那么它取哪个水平对提高收率最有利？

第一个问题要在比较 3 个因素中获得解决，第二个问题要在比较每个因素的三个水平中获得解决。要解决第二个问题，即怎样对每个因素的每个水平进行比较，比如，对因素 A（反应温度），怎样比较它的三个水平 $A_1=80^\circ\text{C}$ 、 $A_2=85^\circ\text{C}$ 、 $A_3=90^\circ\text{C}$ 对收率的影响呢？这里共做了 9 次试验，直接从这 9 个数据两两比较是不行的，因为这 9 次试验的条件没有两个是相同的，也就是说没有比较的基础。但是如果我们把这 9 个试验数据适当组合起来，便会发现某种可比性，这就是前面曾提到过的正交设计的整齐可比性。

首先分析因素 A。因素 A 排在第 1 列，所以要从第 1 列来分析。如果把包含 A 因素“1”水平的每次试验（第 1、2、3 号试验）算做第一组，同样，把包含 A 因素“2”水平、“3”水平的各三次试验（第 4、5、6 号及第 7、8、9 号试验）分别算第二组、第三组。那么，九次试验就分成了三组。在这三组试验中，各因素的水平出现的情况如表 1-7 所示。

表 1-7 试验安排表

列号 试验号	A	B	C
1,2,3	全是 A_1	B_1 一次 B_2 一次 B_3 一次	C_1 一次 C_2 一次 C_3 一次
4,5,6	全是 A_2	B_1 一次 B_2 一次 B_3 一次	C_1 一次 C_2 一次 C_3 一次
7,8,9	全是 A_3	B_1 一次 B_2 一次 B_3 一次	C_1 一次 C_2 一次 C_3 一次

由表 1-7 可看出, A_1 、 A_2 、 A_3 各自所在的那组试验中, 其他因素 (B 、 C) 的 1、2、3 水平都分别出现了一次。

把第一组试验得到的试验数据相加后, 取平均值, 即将第 1 列 1 水平对应的第 1、2、3 号试验数据相加后取平均值, 其和记为 K_1 , 平均值 $k_1 = K_1/3$ 。

$$K_1^A = x_1 + x_2 + x_3 = 31 + 54 + 38 = 123$$

$$k_1^A = \frac{K_1^A}{3} = \frac{123}{3} = 41$$

同理: 把第二组试验得到的数据相加后取平均值, 即将第 1 列 2 水平所对应的 4、5、6 号试验数据相加得:

$$K_2^A = x_4 + x_5 + x_6 = 53 + 49 + 42 = 144$$

$$k_2^A = \frac{K_2^A}{3} = \frac{144}{3} = 48$$

同样, 将第 1 列 3 水平所对应的第 7、8、9 号试验数据相加得:

$$K_3^A = x_7 + x_8 + x_9 = 57 + 62 + 64 = 183$$

$$k_3^A = \frac{K_3^A}{3} = \frac{183}{3} = 61$$

于是, 我们可以将 K_1^A 看作是这三次试验的数据和, 即在这三次试验中, 只有 A_1 水平出现三次, 而 B 、 C 两个因素的 1、2、3 水平各出现一次 (如表 1-7 所示), 数据和 K_1^A 反映了三次 A_1 水平的影响和 B 、 C 每个因素的 1、2、3 水平各一次的影响。同样 K_2^A (K_3^A) 反映了三次 A_2 (A_3) 水平及 B 、 C 每个因素的三个水平各一次的影响。

当我们比较 K_1^A 、 K_2^A 、 K_3^A 的大小时, 可以认为 B 、 C 对 K_1^A 、 K_2^A 、 K_3^A 的影响是大体相同的。因此, 可以把 k_1^A 、 k_2^A 、 k_3^A 之间的差异看作是是由于 A 取了三个不同的水平引起的。这也即是前面所讲的正交设计的整齐可比性。

用同样的方法分析 B 因素。因素排在第 2 列, 所以要从第 2 列来分析。把包含 B_1 水平的第 1、4、7 号试验数据相加记作 K_1^B , 把包含 B_2 水平的第 2、5、8 号试验数据相加记作 K_2^B 。把包含 B_3 水平的第 3、6、9 号试验数据之和相加记作 K_3^B 。

即:

$$K_1^B = x_1 + x_4 + x_7 = 31 + 53 + 57 = 141$$

$$k_1^B = \frac{K_1^B}{3} = \frac{141}{3} = 47$$

$$K_2^B = x_2 + x_5 + x_8 = 54 + 49 + 62 = 165$$

$$k_2^B = \frac{K_2^B}{3} = \frac{165}{3} = 55$$

$$K_3^B = x_3 + x_6 + x_9 = 38 + 42 + 64 = 144$$

$$k_3^B = \frac{K_3^B}{3} = \frac{144}{3} = 48$$

从表 1-8 可看出, 在 B 因素取某一水平的三次试验中, 其他 A 、 C 的三个水平也是各出现一次。所以, 按第二列计算的 k_1^B 、 k_2^B 、 k_3^B 之间的差异同样是由于 B 取了三个不同的水平而引起的。

表 1-8 试验安排表

列号 试验号	A	B	C
1,4,7	A ₁ 一次 A ₂ 一次 A ₃ 一次	全是 B ₁	C ₁ 一次 C ₂ 一次 C ₃ 一次
2,5,8	A ₁ 一次 A ₂ 一次 A ₃ 一次	全是 B ₂	C ₁ 一次 C ₂ 一次 C ₃ 一次
3,6,9	A ₁ 一次 A ₂ 一次 A ₃ 一次	全是 B ₃	C ₁ 一次 C ₂ 一次 C ₃ 一次

按照这个方法同样可以计算出因素 C 的 k_1^C 、 k_2^C 、 k_3^C 。总之，按正交表各列计算的 K_1 、 K_2 、 K_3 的数值差异，就反映了各列所排因素取了不同水平对指标的影响。

将第一列的 k_1 、 k_2 、 k_3 中最大值与最小值之差算出来，我们把这个差值叫做极差。

即：第一列(A 因素) = $k_3^A - k_1^A = 61 - 41 = 20$

第二列(B 因素) = $k_2^B - k_1^B = 55 - 47 = 8$

第三列(C 因素) = $k_2^C - k_1^C = 57 - 45 = 12$

第一列算出的极差的大小，反映了该列所排因素选取的水平变动对指标影响的大小。

为此，我们计算了各列的 K_1 、 K_2 、 K_3 、 k_1 、 k_2 、 k_3 和 R，并把它列成表 1-9。这样就完成了试验数据的计算这一步。今后，就用这种表格化的办法进行计算。

表 1-9 试验数据与计算分析表

列号 试验号	A 温度/℃ 1	B 时间/min 2	C 用碱量/% 3	试验指标 转化率/%
1	1(80℃)	1(90分)	1(5%)	31
2	1(80℃)	2(120分)	2(6%)	54
3	1(80℃)	3(150分)	3(7%)	38
4	2(85℃)	1	2	53
5	2(85℃)	2	3	49
6	2(85℃)	3	1	42
7	3(90℃)	1	3	57
8	3(90℃)	2	1	62
9	3(90℃)	3	2	64
K_1	123	141	135	
K_2	144	165	171	
K_3	183	144	144	
k_1	41	47	45	
k_2	48	55	57	
k_3	61	48	48	
R	20	8	12	

根据这些计算结果，就可以回答这一节开始提出的问题了。

(1) 各因素对指标的影响谁主、谁次呢？直观容易看出，一个因素对试验结果的影响大，就是主要的。所谓影响大，就是该因素的不同水平对应的平均收率之间的差异大。相反，一个因素对试验结果的影响小，就是次要的，也就是说，该因素的不同水平所对应的平