高等学校教材

试验设计与数据处理

Experiment Design and Data Processing

李云雁　胡传荣　编著

化学工业出版社
教材出版中心

高等学校教材

试验设计与数据处理

Experiment Design and Data Processing

李云雁　胡传荣　编著

化学工业出版社
教材出版中心
·北京·

（京）新登字 039 号

图书在版编目（CIP）数据

试验设计与数据处理/李云雁，胡传荣编著．—北京：化学工业出版社，2005.2
高等学校教材
ISBN 7-5025-6438-1

Ⅰ．试…　Ⅱ．①李…②胡…　Ⅲ．①试验设计（数学）-高等学校-教材②数据处理-高等学校-教材　Ⅳ．O212.6

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2004）第 137211 号

高等学校教材
试验设计与数据处理
Experiment Design and Data Processing
李云雁　胡传荣　编著
责任编辑：赵玉清
责任校对：陈　静　李　军
封面设计：潘　峰
*
化学工业出版社
教材出版中心　出版发行
（北京市朝阳区惠新里 3 号　邮政编码 100029）
发行电话：（010）64982530
http://www.cip.com.cn
*
新华书店北京发行所经销
北京市昌平振南印刷厂印刷
三河市前程装订厂装订
开本 787mm×1092mm　1/16　印张 15¾　字数 384 千字
2005 年 3 月第 1 版　2005 年 3 月北京第 1 次印刷
ISBN 7-5025-6438-1/G·1646
定　价：28.00 元

前　言

对于化工、化学、食品、轻工、制药、生物、材料、环境、农林等需要实验与观测的学科专业，经常需要通过试验来寻找所研究对象的变化规律，并通过对规律的研究达到各种实用的目的，如提高产量、降低消耗、提高产品性能或质量等。自然科学和工程技术中所进行的试验，是一种有计划的实践，科学地试验设计，能用较少的试验次数，达到预期的试验目标，反之会事倍功半，甚至劳而无功。试验过程中会产生大量的试验数据，只有对试验数据进行合理地分析和处理，才能获得研究对象的变化规律，达到指导生产和科研的目的。

本书结合大量实例，介绍了一些常用的试验设计及试验数据处理方法在科学试验和工业生产中的实际应用，并介绍了 Excel 在试验数据处理中的强大功能。全书分为 10 章，第 1 章介绍了试验数据的误差分析，这是试验数据处理的第 1 步，合理的误差分析可以提高试验数据的可靠性和准确性；第 2 章介绍了试验数据的图表处理法，图表是试验数据处理的基础；第 3 章介绍了试验数据方差分析的基本方法，通过方差分析可以判断试验因素对试验结果有显著影响；第 4 章介绍了试验数据的回归分析，这是试验数据处理最常用和有效的统计方法，通过回归分析可以确定试验因素与试验结果之间近似的函数关系式，可为试验优化设计奠定基础。这前 4 章内容属于试验数据处理的范畴，但它们总是伴随各种试验设计方法出现。第 5～9 章介绍了常用的几种试验设计方法，通过合理的试验设计，能根据较少的试验获得较好的试验结果。其中第 5 章优选法介绍了一些通俗的单因素、双因素的试验设计方法；第 6 章介绍了目前最常用的正交试验设计，这是一种借助正交表安排试验的一种方法，它能从众多的试验方案中挑选出具有代表性的少数试验，并能根据这些少数试验的结果，确定较优试验方案及一些规律性的结；第 7 章介绍了均匀试验设计，它主要考虑试验点均匀分布，尤其适用于因素水平多或试验范围较大的复杂试验；第 8 章介绍了回归正交设计，这是一种将正交设计与回归分析的优点相结合的一种试验设计方法；第 9 章介绍的配方试验设计为产品最优配方的寻找提供了科学的方法。每种试验设计方法都有其优点，也有其局限性，根据实际情况选取合适的方法。第 10 章介绍了 Excel 在试验数据分析计算中的应用，该章结合具体的实例，重点介绍了如何利用 Excel 生成试验数据进行初步整理、绘制图表、进行方差分析和回归分析等。

本书所介绍的各种试验设计与数据处理方法，大多是以概率论、数理统计等数学理论知识为基础的，但本书注重实际方法的应用，力求淡化数学理论，深入浅出，通俗易懂。书中列举了大量与化工、化学、轻工、食品、制药、生物、材料、环境、农林等专业有关的例题和习题，可作为相关专业本科生和研究生的教材，也可供相关学科的科研、教学和设计人员阅读。

衷心感谢武汉工业学院副校长韦一良教授、生物与化学工程系主任王亚林教授及武汉工

业学院食品学院、生物与化学工程系和教务处相关人士对本书的关心和支持。

本书参考了一些文献资料，在此也向这些文献资料的作者表示诚挚的谢意。

鉴于作者学识有限，经验不足，书中难免有遗漏和错误之处，恳请读者指正。

编　者

2004年11月

目　　录

0 引　言

0.1 试验设计与数据处理的发展概况

到目前为止，本学科已经经过了80多年的研究和实践，已成为广大技术人员与科学工作者必备的基本理论知识。实践表明，该学科与实际的结合，在工、农业生产中产生了巨大的社会效益和经济效益。

20世纪20年代，英国生物统计学家及数学家费歇（R. A. Fisher）首先提出了方差分析，并将其应用于农业、生物学、遗传学等方面，取得了巨大的成功，在试验设计和统计分析方面做出了一系列先驱工作，开创了一门新的应用技术学科，从此试验设计成为统计科学的一个分支。20世纪50年代，日本统计学家田口玄一将试验设计中应用最广的正交设计表格化，在方法解说方面深入浅出，为试验设计的更广泛使用做出了巨大的贡献。

中国从20世纪50年代开始研究这门学科，并在正交试验设计的观点、理论和方法上都有新的创新，编制了一套适用的正交表，简化了试验程序和试验结果的分析方法，创立了简单易学、行之有效的正交试验设计法。同时，著名数学家华罗庚教授也在国内积极倡导和普及“优选法”，从而使试验设计的概念得到普及。随着科学技术工作的深入发展，中国数学家王元和方开泰于1978年首先提出了均匀设计，该设计考虑如何将设计点均匀地散布在试验范围内，使得能用较少的试验点获得最多的信息。随着计算机技术的发展和进步，出现了各种针对试验设计和试验数据处理的软件，使试验数据的分析计算不再繁杂，极大地促进了本学科的快速发展和普及。

0.2 试验设计与数据处理的意义

在科学研究和工农业生产中，经常需要通过试验来寻找所研究对象的变化规律，并通过对规律的研究达到各种实用的目的，如提高产量、降低消耗、提高产品性能或质量等，特别是新产品试验，未知的东西很多，要通过大量的试验来摸索工艺条件或配方。

自然科学和工程技术中所进行的试验，是一种有计划的实践，只有科学的试验设计，才能用较少的试验次数，在较短的时间内达到预期的试验目标；反之，往往会浪费大量的人力、物力和财力，甚至劳而无功。另外，随着试验进行，必然会得到大量的试验数据，只有对试验数据进行合理的分析和处理，才能获得研究对象的变化规律，达到指导生产和科研的目的。可见，最优试验方案的获得，必须兼顾试验设计方法和数据处理两方面，两者是相辅相成、互相依赖、缺一不可的。

在试验设计之前，试验者首先应对所研究的问题有一个深入的认识，如试验目的，影响试验结果的因素，每个因素的变化范围等，然后才能选择合理的试验设计方法，达到科学安排试验的目的。在科学试验中，试验设计一方面可以减少试验过程的盲目性，使试验过程更有计划；另一方面还可以从众多的试验方案中，按一定规律挑选出少数试验。

合理的试验设计只是试验成功的充分条件，如果没有试验数据的分析计算，就不能对所研究的问题有一个明确的认识，也不可能从试验数据中寻找到规律性的信息，所以试验设计

都是与一定的数据处理方法相对应的。试验数据处理在科学试验中的作用主要体现在如下几个方面：

（1）通过误差分析，可以评判试验数据的可靠性；

（2）确定影响试验结果的因素主次，从而可以抓住主要矛盾，提高试验效率；

（3）可以确定试验因素与试验结果之间存在的近似函数关系，并能对试验结果进行预测和优化；

（4）试验因素对试验结果的影响规律，为控制试验提供思路；

（5）确定最优试验方案或配方。

试验设计（experiment design）与数据处理（data processing）虽然归于数理统计的范畴，但它也属于应用技术学科，具有很强的适用性。一般意义上的数理统计的方法主要用于分析已经获得的数据，对所关心的问题做出尽可能精确的判断，而对如何安排试验方案的设计没有过多的要求。试验设计与数据处理则是研究如何合理地安排试验，有效地获得试验数据，然后对试验数据进行综合的科学分析，以求尽快达到优化实验的目的。所以完整意义上的试验设计实质上是试验的最优化设计。

1 试验数据的误差分析

试验的成果最初往往是以数据的形式表达的，如果要得到更深入的结果，就必须对试验数据作进一步的整理工作。为了保证最终结果的准确性，应该首先对原始数据的可靠性进行客观的评定，也就是需对试验数据进行误差分析（error analysis）。

在试验过程中由于实验仪器精度的限制，实验方法的不完善，科研人员认识能力的不足和科学水平的限制等方面的原因，在试验中获得的试验值与它的客观真实值并不一致，这种矛盾在数值上表现为误差。可见，误差是与准确相反的一个概念，可以用误差来说明试验数据的准确程度。试验结果都具有误差，误差自始至终存在于一切科学实验过程中。随着科学水平的提高和人们经验、技巧、专门知识的丰富，误差可以被控制得越来越小，但是不能完全消除。

1.1 真值与平均值

1.1.1 真值

真值（true value）是指在某一时刻和某一状态下，某量的客观值或实际值。真值一般是未知的，但从相对的意义上来说，真值又是已知的。例如，平面三角形三内角之和恒为180°；同一非零值自身之差为零，自身之比为1；国家标准样品的标称值；国际上公认的计量值，如碳12的相对原子质量为12，绝对温度等于−273.15K等；高精度仪器所测之值和多次试验值的平均值等。

1.1.2 平均值

在科学试验中，虽然试验误差在所难免，但平均值（mean）可综合反映试验值在一定条件下的一般水平，所以在科学试验中，经常将多次试验值的平均值作为真值的近似值。平均值的种类很多，在处理试验结果时常用的平均值有以下几种。

（1）算术平均值（arithmetic mean）

算术平均值是最常用的一种平均值。设有 n 个试验值：x_1，x_2，…，x_n，则它们的算术平均值为：

$$\bar{x} = \frac{x_1 + x_2 + \cdots + x_n}{n} = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i}{n} \tag{1-1}$$

式中，x_i 表示单个试验值，下同。

同样试验条件下，如果多次试验值服从正态分布，则算术平均值是这组等精度试验值中的最佳值或最可信赖值。

（2）加权平均值（weighted mean）

如果某组试验值是用不同的方法获得的，或由不同的试验人员得到的，则这组数据中不同值的精度或可靠性不一致，为了突出可靠性高的数值，则可采用加权平均值。设有 n 个试验值：x_1，x_2，…，x_n，则它们的加权平均值为：

$$\overline{x}_w = \frac{w_1 x_1 + w_2 x_2 + \cdots + w_n x_n}{w_1 + w_2 + \cdots + w_n} = \frac{\sum_{i=1}^{n} w_i x_i}{\sum_{i=1}^{n} w_i} \tag{1-2}$$

式中，w_1，w_2，…，w_n 代表单个试验值对应的权（weight）。如果某值精度较高，则可给以较大的权数，加重它在平均值中的分量。例如，如果我们认为某一个数比另一个数可靠两倍，则两者的权的比是 2∶1 或 1∶0.5。显然，加权平均值的可靠性在很大程度上取决于科研人员的经验。

试验值的权是相对值，因此可以是整数，也可以是分数或小数。权不是任意给定的，除了依据实验者的经验之外，还可以按如下方法给予。

① 当试验次数很多时，可以将权理解为试验值 x_i 在很大的测量总数中出现的频率 n_i/n。

② 如果试验值是在同样的试验条件下获得的，但来源于不同的组，这时加权平均值计算式中的 x_i 代表各组的平均值，而 w_i 代表每组试验次数，如例 1-1。若认为各组试验值的可靠程度与其出现的次数成正比，则加权平均值即为总算术平均值。

③ 根据权与绝对误差的平方成反比来确定权数，如例 1-2。

表 1-1　例 1-1 数据表

组	测量值	平均值
1	100.357,100.343,100.351	100.350
2	100.360,100.348	100.354
3	100.350,100.344,100.336,100.340,100.345	100.343
4	100.339,100.350,100.340	100.343

例 1-1　在实验室称量某样品时，不同的人得 4 组称量结果如表 1-1 所示，如果认为各测量结果的可靠程度仅与测量次数成正比，试求其加权平均值。

解： 由于各测量结果的可靠程度仅与测量次数成正比，所以每组试验平均值的权值即为对应的试验次数，即 $w_1=3$，$w_2=2$，$w_3=5$，$w_4=3$，所以加权平均值为：

$$\begin{aligned}\overline{x}_w &= \frac{w_1\overline{x}_1 + w_2\overline{x}_2 + w_3\overline{x}_3 + w_4\overline{x}_4}{w_1+w_2+w_3+w_4}\\ &= \frac{100.350\times3+100.354\times2+100.343\times5+100.343\times3}{3+2+5+3}\\ &=100.346\end{aligned}$$

例 1-2　在测定溶液 pH 值时，得到两组试验数据，其平均值为：$\overline{x}_1=8.5\pm0.1$；$\overline{x}_2=8.53\pm0.02$，试求它们的平均值。

解：

$$w_1=\frac{1}{0.1^2}=100,\quad w_2=\frac{1}{0.02^2}=2500$$

$$w_1 : w_2 = 1 : 25$$

$$\overline{\mathrm{pH}}=\frac{8.5\times1+8.53\times25}{1+25}=8.53$$

(3) 对数平均值（logarithmic mean）

如果试验数据的分布曲线具有对数特性，则宜使用对数平均值。设有两个数值 x_1、x_2，都为正数，则它们的对数平均值为：

$$\overline{x}_L=\frac{x_1-x_2}{\ln x_1-\ln x_2}=\frac{x_1-x_2}{\ln\dfrac{x_1}{x_2}}=\frac{x_2-x_1}{\ln\dfrac{x_2}{x_1}} \tag{1-3}$$

注意，两数的对数平均值总小于或等于它们的算术平均值。如果$\frac{1}{2}\leqslant\frac{x_1}{x_2}\leqslant 2$时，可用算术平均值代替对数平均值，而且误差不大（≤4.4%）。

（4）几何平均值（geometric mean）

设有 n 个正试验值：x_1，x_2，…，x_n，则它们的几何平均值为：

$$\overline{x}_G=\sqrt[n]{x_1x_2\cdots x_n}=(x_1x_2\cdots x_n)^{\frac{1}{n}} \tag{1-4}$$

对上式两边同时取对数，得：

$$\lg\overline{x}_G=\frac{\sum_{i=1}^{n}\lg x_i}{n} \tag{1-5}$$

可见，当一组试验值取对数后所得数据的分布曲线更加对称时，宜采用几何平均值。一组试验值的几何平均值常小于它们的算术平均值。

（5）调和平均值（harmonic mean）

设有 n 个正试验值：x_1，x_2，…，x_n，则它们的调和平均值为：

$$H=\frac{n}{\frac{1}{x_1}+\frac{1}{x_2}+\cdots+\frac{1}{x_n}}=\frac{n}{\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{x_i}} \tag{1-6}$$

或

$$\frac{1}{H}=\frac{\frac{1}{x_1}+\frac{1}{x_2}+\cdots+\frac{1}{x_n}}{n}=\frac{\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{x_i}}{n} \tag{1-7}$$

可见调和平均值是试验值倒数的算术平均值的倒数，它常用在涉及到与一些量的倒数有关的场合。调和平均值一般小于对应的几何平均值和算术平均值。

综上，不同的平均值都有各自适用场合，选择哪种求平均值的方法取决于试验数据本身的特点，如分布类型、可靠性程度等。

1.2 误差的基本概念

1.2.1 绝对误差

试验值与真值之差称为绝对误差（absolute error），即：

$$绝对误差=试验值-真值 \tag{1-8}$$

绝对误差反映了试验值偏离真值的大小，这个偏差可正可负。通常所说的误差一般是指绝对误差。如果用 x，x_t，Δx 分别表示试验值、真值和绝对误差，则有：

$$\Delta x=x-x_t \tag{1-9}$$

所以有：

$$x_t-x=\pm|\Delta x| \tag{1-10}$$

或

$$x_t=x\pm|\Delta x| \tag{1-11}$$

由此可得：

$$x-|\Delta x|\leqslant x_t\leqslant x+|\Delta x| \tag{1-12}$$

由于真值一般是未知的，所以绝对误差也就无法准确计算出来。虽然绝对误差的准确值

通常不能求出，但是可以根据具体情况，估计出它的大小范围。设$|\Delta x|_{max}$为最大的绝对误差，则有：

$$|\Delta x|=|x-x_t|\leqslant|\Delta x|_{max} \tag{1-13}$$

这里$|\Delta x|_{max}$又称为试验值 x 的绝对误差限或绝对误差上界。

由式（1-13）可得：

$$x-|\Delta x|_{max}\leqslant x_t\leqslant x+|\Delta x|_{max} \tag{1-14}$$

所以有时也可以用下式表示真值的范围：

$$x_t\approx x\pm|\Delta x|_{max} \tag{1-15}$$

在试验中，如果对某物理量只进行一次测量，常常可依据测量仪器上注明的精度等级，或仪器最小刻度作为单次测量误差的计算依据。一般可取最小刻度值作为最大绝对误差，而取其最小刻度的一半作为绝对误差的计算值。

例如，某压强表注明的精度为 1.5 级，则表明该表绝对误差为最大量程的 1.5%，若最大量程为 0.4MPa，该压强表绝对误差为：0.4×1.5%=0.006 MPa；又如某天平的最小刻度为 0.1mg，则表明该天平有把握的最小称量质量是 0.1mg，所以它的最大绝对误差为 0.1 mg。可见，对于同一真值的多个测量值，可以通过比较绝对误差限的大小，来判断它们精度的大小。

根据绝对误差、绝对误差限的定义可知，它们都具有与试验值相同的单位。

1.2.2 相对误差

绝对误差虽然在一定条件下能反映试验值的准确程度，但还不全面。例如，两城市之间的距离为 200450m，若测量的绝对误差为 2m，则这次测量的准确度是很高的；但是 2m 的绝对误差对于人身高的测量而言是不能允许的。所以，为了判断试验值的准确性，还必须考虑试验值本身的大小，故引出了相对误差（relative error）。

$$相对误差=\frac{绝对误差}{真值} \tag{1-16}$$

如果用 E_R 表示相对误差，则有：

$$E_R=\frac{\Delta x}{x_t}=\frac{x-x_t}{x_t} \tag{1-17}$$

或者

$$E_R=\frac{\Delta x}{x_t}\times 100\% \tag{1-18}$$

显然易见，一般$|E_R|$小的试验值精度较高。

由式（1-18）可知，相对误差可以由绝对误差求出；反之，绝对误差也可由相对误差求得，其关系为：

$$\Delta x=E_R x_t \tag{1-19}$$

所以有：

$$x_t=x\pm|\Delta x|=x\left(1\pm\left|\frac{\Delta x}{x}\right|\right)\approx x\left(1\pm\left|\frac{\Delta x}{x_t}\right|\right)=x(1\pm|E_R|) \tag{1-20}$$

由于 x_t 和 Δx 都不能准确求出，所以相对误差也不能准确求出，与绝对误差类似，也可以估计出相对误差的大小范围，即：

$$|E_R|=\left|\frac{\Delta x}{x_t}\right|\leqslant\left|\frac{\Delta x}{x_t}\right|_{max} \tag{1-21}$$

这里$\left|\frac{\Delta x}{x_t}\right|_{max}$称为试验值 x 的最大相对误差，或称为相对误差限和相对误差上界。在实际计算中，由于真值 x_t 为未知数，所以常常将绝对误差与试验值或平均值之比作为相对误差，即：

$$E_R=\frac{\Delta x}{x} \quad 或 \quad E_R=\frac{\Delta x}{\bar{x}} \tag{1-22}$$

相对误差和相对误差限是无因次的。为了适应不同的精度，相对误差常常表示为百分数（%）或千分数（‰）。

需要指出的是，在科学实验中，由于绝对误差和相对误差一般都无法知道，所以通常将最大绝对误差和最大相对误差分别看作是绝对误差和相对误差，在表示符号上也可以不加区分。

例 1-3 已知某样品质量的称量结果为：(58.7±0.2)g，试求其相对误差。

解：依题意，称量的绝对误差为 0.2g，所以相对误差为

$$E_R=\frac{\Delta x}{x}=\frac{0.2}{58.7}=3\times10^{-3}或 0.3\%$$

例 1-4 已知由试验测得水在 20℃时的密度 $\rho=997.9\text{kg/m}^3$，又已知其相对误差为 0.05%，试求 ρ 所在的范围。

解：∵

$$E_R=\frac{\Delta x}{x}=\frac{\Delta x}{997.9}=0.05\%$$

∴

$$\Delta x=997.9\times0.05\%=0.5\text{kg/m}^3$$

∴ ρ 所在的范围为：

$$997.4\text{kg/m}^3<\rho<998.4\text{kg/m}^3$$

1.2.3 算术平均误差

设试验值 x_i 与算术平均值$\bar{x}$之间的偏差（discrepancy）为 d_i，则算术平均误差（average discrepancy）定义式为：

$$\Delta=\frac{\sum_{i=1}^{n}|x_i-\bar{x}|}{n}=\frac{\sum_{i=1}^{n}|d_i|}{n} \tag{1-23}$$

求算术平均误差时，偏差 d_i 可能为正也可能为负，所以一定要取绝对值。显然，算术平均误差可以反映一组试验数据的误差大小，但是无法表达出各试验值间的彼此符合程度。

1.2.4 标准误差

标准误差（standard error）也称作均方根误差（mean-root-square error）、标准偏差（standard discrepancy），简称为标准差（standard deviation）。当试验次数 n 无穷大时，称为总体（population）标准差，其定义为：

$$\sigma=\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}d_i^2}{n}}=\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2}{n}}=\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}x_i^2-\left(\sum_{i=1}^{n}x_i\right)^2/n}{n}} \tag{1-24}$$

但在实际的科学试验中，试验次数一般为有限次，于是又有样本（sample）标准差，其定义为：

$$s=\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}d_i^2}{n-1}}=\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2}{n-1}}=\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}x_i^2-\left(\sum_{i=1}^{n}x_i\right)^2/n}{n-1}} \tag{1-25}$$