



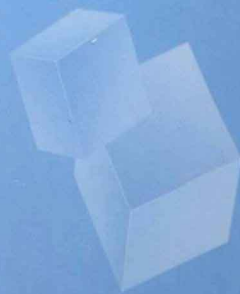
普通高等教育材料科学与工程“十二五”规划教材

材料工程实验设计 及数据处理

张新平 封善飞 洪祥挺 主编
陈 飞 陈 珊 副主编



国防工业出版社
National Defense Industry Press



普通高等教育材料科学与工程“十二五”

材料工程实验设计及数据处理

张新平 封善飞 洪祥挺 主编
陈 飞 陈 珊 副主编

国防工业出版社

· 北京 ·

内 容 简 介

本书内容包括回归分析、方差分析的 Excel 软件实现方法,单因素实验优化设计、多因素实验设计、正交实验设计和均匀设计等简单实用的实验设计方法。各章节间有一定的独立性,读者可以根据自己的情况有选择地学习。书中例子大部分选自作者的科研论文和国内外材料科学与工程学科其他研究人员的科研论文。

本书可作为工科相关领域技术人员的参考书,也可作为高等院校相关专业高年级本科生及研究生学习实验设计并进行毕业论文实践的教材。

图书在版编目(CIP)数据

材料工程实验设计及数据处理 / 张新平,封善飞,洪祥挺主编.

—北京:国防工业出版社,2013.7

普通高等教育材料科学与工程“十二五”规划教材

ISBN 978-7-118-08856-4

I. ①材… II. ①张… ②封… ③洪… III. ①工程材料—试验设计—高等学校—教材②工程材料—数据处理—高等学校—教材
IV. ①TB3

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 157230 号

※

国防工业出版社出版发行

(北京市海淀区紫竹院南路 23 号 邮政编码 100048)

北京奥鑫印刷厂印刷

新华书店经售

*

开本 787×1092 1/16 印张 10½ 字数 237 千字

2013 年 7 月第 1 版第 1 次印刷 印数 1—3000 册 定价 23.00 元

(本书如有印装错误,我社负责调换)

国防书店:(010)88540777

发行邮购:(010)88540776

发行传真:(010)88540755

发行业务:(010)88540717

普通高等教育材料科学与工程“十二五”规划教材 编 委 会

主任委员 朱运田

副主任委员 崔 崇 吴 鏊

委 员 (按姓氏拼音排序)

陈 光 丁锡锋 杜宇雷 黄洁雯

刘 瑛 王 雄 熊党生 颜银标

杨 森 张新平 赵 军 赵永好

朱和国 邹友生

前 言

认识世界可以通过学习,更重要的是通过实践。有理论指导的实践才是有目的的实践、科学的实践,只有通过这样的实践才能更深刻地认识世界。实验就是一种理想的科学实践,是在寻求真理过程中的一种积极的、主动性的活动。目前各高校均在强调学生应用知识的能力的培养,通过学生动手做实验提高动手能力。但很多情况下仅靠专业知识是无法做好实验的,还需要事先把实验设计好,并把实验数据分析好。必须要有正确的理论来指导实验,这就涉及到实验设计的问题。但目前现状令人担忧,由于种种原因,相当一部分理工科学生对于应该掌握的实验设计方法没有掌握,甚至是不知道。这对以实验为主要研究手段的未来工程师们、科学家们不能不说是个缺陷!

针对这种情况,作者自 2006 年开始在南京理工大学材料科学与工程学院本科生中讲授“实验设计”课程,其目标是培养材料学院本科生能够在科研训练、工程训练、毕业设计以及将来的更高层次学习、工作中使用实验设计方法,提高科研质量和效率。

本书中,作者结合自己的科研论文和国内外材料科学与工程学科其他研究人员科研论文,介绍了相关的实验设计方法以及科研思想,让学生对材料科学与工程学科的科研有体会,激发起科研兴趣。

本书第一章由张新平编写,第二、三章由封善飞编写,第四、五章由洪祥挺编写,第六章由陈飞编写,第七章由陈珊编写。

全书由张新平、封善飞、洪祥挺主编。在本书编写过程中,国防工业出版社给予了热情的帮助和指导;侯怀宇、朱荣、刘瑛、尹德良等参加了部分工作。全书参考了国内外有关教材、科技著作及论文,并引用了有关文献和教材的资料和插图,在此特向有关作者和单位致以诚挚的感谢。本书感谢南京理工大学“十二·五”规划教材的项目资助。

限于编者的水平和视野,本书难免存在一些纰漏甚至错误,诚恳地希望读者予以指正。

目 录

第一章 实验设计与数据处理简介	1
1.1 实验设计的基本概念	1
1.2 实验设计的作用	1
1.3 实验设计的类型	2
1.3.1 实验设计的基本类型	2
1.3.2 优化实验的基本类型	3
1.4 实验设计的要素与原则	5
1.4.1 实验设计的要素	5
1.4.2 实验设计的四原则	6
1.5 实验设计中的误差控制	8
1.5.1 实验误差	8
1.5.2 实验数据的精准度	10
1.5.3 坏值及其剔除	11
1.6 实验设计中因素与水平的选取	12
1.6.1 因素的选取	12
1.6.2 水平的选取	12
1.7 数据处理方法	14
1.8 实验设计与数据处理的基本过程	15
习题 1	15
第二章 对比实验与方差分析	16
2.1 基于 Excel 的 t 检验与方差分析	16
2.2 两个处理的水平对比 t 检验	18
2.2.1 两个处理的水平对比 t 检验实例	18
2.2.2 正确判断两个处理水平对比 t 检验的实验条件	20
2.3 多处理对比与方差分析	24
2.3.1 单因素方差分析	24
2.3.2 两因素不重复实验的方差分析	26
2.3.3 两因素等重复实验的方差分析	27
2.3.4 有关方差分析的两个问题	28

习题 2	29
第三章 回归分析	31
3.1 一元线性回归分析	31
3.2 一元非线性回归分析	34
3.3 多元线性回归分析	40
3.4 多元非线性回归分析	41
3.5 逐步回归分析	42
3.5.1 逐步回归分析的主要思路	42
3.5.2 逐步回归分析的主要计算步骤	43
3.5.3 用 Excel 作逐步回归分析	44
3.5.4 逐步回归法计算的实例	45
习题 3	48
第四章 单因素优选法	50
4.1 均分法	50
4.2 对分法	51
4.3 黄金分割法	52
4.4 分数法	55
4.4.1 所有可能的实验总数正好是某一个 F_{n-1}	56
4.4.2 所有可能的实验总数大于某一个 $F_n - 1$ 而小于 $F_{n+1} - 1$	57
4.5 抛物线法	58
4.6 分批实验法	59
4.7 单因素优选法在材料科学与工程中的应用	60
习题 4	63
第五章 多因素实验设计	64
5.1 多因素优选实验概述	64
5.1.1 多因素优化实验设计的广泛应用	64
5.1.2 多因素优化实验设计	65
5.2 因素轮换法	66
5.3 随机实验法	67
5.4 拉丁方实验法	70
5.5 全面实验法	71
5.6 多因素优选实验设计在材料科学与工程中的应用	75
习题 5	79

第六章 正交设计	81
6.1 正交表及其基本性质	81
6.2 正交实验设计的基本步骤	82
6.3 正交实验设计结果的直观分析	83
6.4 正交实验设计结果的方差分析	85
6.4.1 计算离差平方和与方差分析	85
6.4.2 基于 Excel 的正交实验设计方差分析	86
6.5 正交实验的灵活使用	87
6.5.1 有交互作用的正交设计	88
6.5.2 水平不等的正交设计	90
6.6 正交实验在材料科学与工程中的应用	92
习题 6	96
第七章 均匀设计	98
7.1 均匀设计和正交设计的比较	98
7.2 均匀设计表及构造	98
7.2.1 均匀设计表符号及特点	98
7.2.2 均匀设计表构造	100
7.3 用均匀设计表安排实验	101
7.4 均匀设计的实验结果分析	104
7.5 均匀设计的灵活应用	106
7.6 配方均匀设计	106
7.6.1 配方均匀设计	107
7.6.2 有约束的配方均匀设计	108
7.7 均匀设计在材料科学与工程中的应用	111
7.7.1 均匀设计法在新型摩擦材料研制中的应用	111
7.7.2 超声速电弧喷涂 Ti-Al 合金涂层结合强度与其工艺参数之 间的关系	115
习题 7	116
附录一 常用正交试验表	117
附录二 常用均匀设计表	121
附录三 常用 Excel 函数	142
参考文献	160

第一章 实验设计与数据处理简介

在材料科学与工程等理工科科学研究和生产中,经常需要做许多实验,并通过对实验数据的分析来寻求问题的解决办法。这就提出了如何安排实验和如何分析实验结果的问题,也就是如何进行实验设计和数据处理的问题。

实验设计与数据处理是以概率论、数理统计及线性代数为基础,经济、科学地安排实验和分析处理实验结果的一项科学技术。其主要内容是讨论如何合理地安排实验和科学地分析处理实验结果,从而解决生产中和科学研究中的实际问题。它除要求具备概率论、数理统计及线性代数等基础知识外,还应有较深和较广的专业知识以及丰富的实践经验。只有这三者紧密地结合起来,才能取得良好的效果。

1.1 实验设计的基本概念

实验设计包括优选实验因素,选择因素的水平,确定实验指标。

实验因素(factor)简称为因素或因子,是实验的设计者希望考察的实验条件。因素的具体取值称为水平(level)。

按照因素的给定水平对实验对象所做的操作称为处理(treatment)。接受处理的实验对象称为实验单元。

衡量实验结果好坏程度的指标称为实验指标,也称为响应变量(response variable)。

例如,在研究轧制工艺对 Al/Mg/Al 叠层复合材料结合强度影响时,轧制温度、坯料预热处理工艺、压下率等属于因素;轧制温度的水平为 300℃、350℃等;轧制温度 300℃、坯料双级固溶处理、压下率 20%这样的一组工艺组合进行轧制则是一次处理;铝合金、镁合金板为实验单元;轧制之后测得的结合强度为实验指标。

1.2 实验设计的作用

实验设计研究的是有关实验的设计理论与方法。通常所说的实验设计是以概率论、数理统计及线性代数为理论基础,科学地安排实验方案,正确地分析实验结果,尽快获得优化方案的一种数学方法。

在工农业生产、科学研究和管理实践中,为了开发设计研制新产品、更新老产品,降低原材料、能源等资源消耗,提高产品的产量和质量,做到优质、高产、低消耗,都需要做各种实验。如何做实验大有学问。若实验方案设计正确,实验结果分析得法,就能够以较少的实验次数、较短的实验周期、较低的实验费用,迅速地得到正确的结论和较好的实验效果;反之,实验方案设计不正确,实验结果分析不当,就可能增加实验次数,延长实验周期,造成人力、物力和时间的浪费,不仅难以达到预期的效果,甚至造成实验的全盘失败。因此,

如何科学地进行实验设计是一个非常重要的问题。

国内外实践表明,实验设计可以帮助有效地解决如下问题:

(1) 科学、合理地安排实验,可以减少实验次数,缩短实验周期,节约人力、物力,提高经济效益。尤其当因素水平较多时,效果更为显著。

(2) 在产品的设计和制造中,影响指标值的因素往往很多,通过对实验的设计和结果分析能使我们在众多的因素中分清主次,找出影响指标的主要因素。

(3) 通过实验设计可以分析因素之间交互作用影响的大小。

(4) 通过方差分析,可以分析出实验误差影响的大小,提高实验的精度。

(5) 通过实验设计能尽快地找出较优的设计参数或生产工艺条件,并通过对实验结果的分析、比较,找出最优化方案和进一步实验的方向。

(6) 能对最优方案的指标值进行预测。

一项科学合理的实验安排应能做到以下三点:①实验次数尽可能少;②便于分析和处理实验数据;③通过分析能得到满意的实验结论。

1.3 实验设计的类型

1.3.1 实验设计的基本类型

根据实验的目的,实验设计可以分为五种类型:

1. 演示实验

演示实验的目的是演示一种科学现象,如中小学的各种物理、化学、生物实验课所做的实验。在大学中,大学物理、化学等课程实验中也存在大量的演示实验。只要按照正确的实验条件和实验程序操作,必然得到预定的结果。对该类实验的设计主要是专业设计,使得实验的操作更加简单可行,实验结果更直观清晰。

2. 验证实验

验证实验的目的是验证一种科学推断的正确性,可以作为其他实验方法的补充实验。

验证实验也可以是对已提出的科学现象的重复验证,检验其结果是否正确。例如赫伯特·格莱特教授于1980年首次提出纳米晶固体的构想,开创了全球纳米材料研究新方向,引发并推动了纳米科技的发展。后来其他研究人员在实验室中验证了他的设想。

3. 对比实验

对比实验的目的是检验一种或几种处理的效果。如热处理对中碳钢的力学性能存在显著影响,热处理的工艺参数主要包括加热温度、保温时间、冷却速度等。当改变加热温度、保温时间、冷却速度时,可以得到不同的力学性能。对比这些参数中的一种或多种对中碳钢的力学性能的影响就是一种对比实验。对比实验的设计需要结合专业设计和统计设计两方面的知识,对实验结果的数据分析属于统计学中的假设检验问题。

4. 优化实验

优化实验的目的是高效率地找出实验问题的最优实验条件,这种优化实验是一项尝试性的工作,有可能获得成功,也有可能不成功,所以常把优化实验称为实验(test)。以优化为目的的实验设计则称为实验设计。例如目前流行的正交设计和均匀设计的全称分

别是正交实验设计和均匀实验设计。不过在英文中实验设计和实验设计是同一个名称“design of experiments”,都简称为 DOE。

5. 探索实验

对未知事物的探索性科学研究实验称为探索实验,具体来说包括探索研究对象的未知性质,了解它具有怎样的组成,有哪些属性和特征以及与其他对象或现象的联系等的实验。目前,高校和中小学都会安排一些探索性实验课,培养学生像科学家一样思考问题和解决问题,包括实验的选题、确定实验条件、实验的设计、实验数据的记录以及实验结果的分析等。

探索实验在工程技术中属于开发设计,其设计工作既要依靠专业技术知识,也需要结合使用比较实验和优化实验的方法。在这些实验中使用优化设计技术可以大幅度减少实验次数。

1.3.2 优化实验的基本类型

在上述五大类实验设计类型中,优化实验是一个十分广阔的领域,几乎无所不在。在科研、开发和生产中,优化实验可以达到提高质量、增加产量、降低成本以及保护环境的目的。随着科学技术的迅猛发展,市场竞争的日益激烈,优化实验将会越发显示其巨大的威力。

优化实验的内容十分丰富,可以划分为以下几种类型。

(1) 按实验因素的数目:单因素优化实验和多因素优化实验。

(2) 按实验的目的:指标水平优化和稳健性优化。指标水平优化的目的是优化实验指标的平均水平,例如增加化工产品的回收率,延长产品的使用寿命,降低产品的能耗。稳健性优化的目的是减小产品指标的波动(标准差),使产品的性能更稳定,用廉价的低等级的元件组装出性能稳定质量高的产品。

(3) 按实验的形式:实物实验和计算实验。实物实验包括现场实验和实验室实验两种情况,是主要的实验方式。计算实验是根据数学模型计算出实验指标,在材料科学与工程领域得到大量的应用。如我国工程院院士柳百成教授领导的课题组开展的铸造过程的模拟就是一种计算实验。本书作者开展的轧制复合制备 Al/Mg/Al 叠层复合材料过程的数值模拟也是一种计算实验。

在材料研发的实验领域,计算机仿真技术已广为应用。不管是微观分子和原子层面的材料性质研究,还是宏观温度场、流场、应力场层面的材料热加工成型的工艺设计分析及优化,均大量采用了数值模拟技术。这些模拟技术的应用极大地提高了研发效率,也解决了许多传统实验无法解决的问题。如在材料科学中,基于计算材料学的模拟“实验”成为多粒子系统模型和实验观测之间重要的联系方式。近十年来,对金属间化合物的数值模拟研究进行得迅速而广泛,配合实验研究和加工制造,已取得了令人瞩目的成果。如对 NiAl、Ni₃Al、Cu₃Au、Co₃Ti 等金属间化合物的分子动力学模拟研究已进行得相当深入,我国科学家已将 Ni₃Al 成功地应用到航空航天动力机械制造方面,从而在对金属间化合物的实际应用方面走到世界前列。又如,铸件凝固是高温下在铸型内进行的,难以直接观察,长期以来主要凭经验或以实测资料为依据进行铸造工艺设计,控制铸件的凝固过程。实际生产中,大、中型铸件凝固过程的温度场难以实测,而且也不允许通过实验得到铸件

的合理工艺方案后才进行工艺设计和正式生产,因此以前主要凭经验指导铸件的生产实践。随着计算机模拟技术的发展和金属凝固理论的完善,通过计算机模拟技术的凝固过程成为可能,并直接指导生产实践,这样不仅提高了产品质量,而且节省了大量的人力和时间。

20 世纪 50 年代初,苏联开展了关于合金设计以及无机化合物的计算机预报等早期工作。1962 年苏联在理论上提出了人工半导体超晶格概念,1969 年 Esaki(江崎)和朱兆祥正式从理论和实践上提出了通过改变组分或掺杂来获得人工超晶格。20 世纪 80 年代中期,日本材料界提出了在分子原子水平上混合、构成杂化材料的设想。1985 年日本首次提出了“材料设计学”这一专业方向,并在大学材料系开设该课程。1989 年美国出版了《90 年代的材料科学与工程》报告,认为现代物理和计算机技术的进步,使得材料科学与工程性质正在发生变化,计算机分析与模型化的进展,将使材料科学从定性描述逐渐进入定量描述的阶段。1995,美国 NRC 发表了专门报告,认为由于理论和计算能力的进步,已可实现从理论上预测新材料。

材料的组成、结构、性能、服役性能是材料研究的四大要素,传统的材料研究以实验室研究为主,是一门实验科学。但是,随着对材料性能的要求不断提高,材料学研究对象的空间尺度在不断变小,只对微米级的显微结构进行研究不能揭示材料性能的本质,纳米结构、原子像已成为材料研究的内容,对功能材料甚至要研究到电子层次。因此,材料研究越来越依赖于高端的测试技术,研究难度和成本也越来越高。另外,服役性能在材料研究中越来越受到重视,服役性能的研究就是要研究材料与服役环境的相互作用及其对材料性能的影响。随着材料应用环境的日益复杂化,材料服役性能的实验室研究也变得越来越困难。总之,仅仅依靠实验室的实验来进行材料研究已难以满足现代新材料研究 and 发展的要求。计算机模拟技术可以根据有关的基本理论,在计算机虚拟环境下从纳观、微观、介观、宏观尺度对材料进行多层次研究,也可以模拟超高温、超高压等极端环境下的材料服役性能,模拟材料在服役条件下的性能演变规律、失效机理,进而实现材料服役性能的改善和材料设计。因此,在现代材料学领域中,计算机“实验”已成为与实验室的实验具有同样重要地位的研究手段,而且随着计算材料学的不断发展,它的作用会越来越大。

计算材料学的发展是与计算机科学及技术的迅猛发展密切相关的。从前,即便使用大型计算机也极为困难的一些材料计算,如材料的量子力学计算等,现在使用微机就能够完成,由此可以预见,将来计算材料学必将有更加迅速的发展。另外,随着计算材料学的不断进步与成熟,材料的计算机模拟与设计已不仅仅是材料物理以及材料计算理论学家的热门研究课题,更将成为一般材料研究人员的一个重要研究工具。由于模型与算法的成熟、通用软件的出现,使得材料计算的广泛应用成为现实。因此,计算材料学基础知识已成为现代材料工作者必备的技能之一。

计算材料学涉及材料的各个方面,如不同层次的结构、各种性能等,因此,有很多相应的计算方法。在进行材料计算时,首先要根据所要计算的对象、条件、要求等因素选择适当的方法。要想做好选择,必须了解材料计算方法的分类。目前,主要有两种分类方法:一是按理论模型和方法分类,二是按材料计算的特征空间尺寸(characteristic space scale)分类。材料的性能在很大程度上取决于材料的微结构,材料的用途不同,决定其性能的微结构尺度会有很大的差别。例如,对结构材料来说,影响其力学性能的结构尺度在

微米以上,而对于电、光、磁等功能材料来说可能要小到纳米,甚至是电子结构。因此,计算材料学的研究对象的特征空间尺度从埃到米。时间是计算材料学的另一个重要的参量。对于不同的研究对象或计算方法,材料计算的时间尺度可从 10^{-15} s(如分子动力学方法等)到年(如对于腐蚀、蠕变、疲劳等的模拟)。对于具有不同特征空间、时间尺度的研究对象,均有相应的材料计算方法。目前常用的计算方法包括第一原理从头计算法、分子动力学方法、蒙特卡洛方法、有限元分析等。

现代的计算机运行速度很高,人们往往认为对已知教学模型的情况不必再进行实验设计,只需对所有可能情况全面计算,找出最优的条件就可以了。实际上这种观点是一个误解,在因素和水平数目较多时,即使高速运行的大型计算机也无承担所需的运行时间。例如,为了研究 $\text{Si}(100)2\times 1$ 半导体表面原子结构,美国的 Bell 实验室和 IBM 实验室等几家最大的研究机构都投入了巨大的人力和物力进行了多年的研究工作,但是始终没有获得有效的进展。 $\text{Si}(100)2\times 1$ 的一个原胞中有 5 层共 10 个原子,每个原子的位置用三维坐标来描述,每个坐标取 3 个水平,全面计算需要 3^{10} 次,而每次计算都包含众多复杂的步骤和公式,需要几个小时才能完成,因此对这个问题的全面计算是不可能实现的。后来我国学者建议采用正交实验设计方法,并与美国学者合作,经过两轮 $L_{27}(3^{13})$ 与几轮 $L_9(3^4)$ 正交实验,仅做了几次实验就找到了 $\text{Si}(100)2\times 1$ 表面原子结构模型的最优结果,原子位置准确到原子距的 2%,达到了当今这一课题所能达到的最高精度,得到了世界的公认。

(4) 按实验的过程:序贯实验设计和整体实验设计。序贯实验是从一个起点出发,根据前面实验的结果决定后面实验的位置,使实验的指标不断优化,形象地称为“爬山法”。0.618 法、分数法、因素轮换法都属于爬山法。整体实验是在实验前就把所要做的实验的位置确定好,要求设计的这些实验点能够均匀地分布在全部可能的实验点之中,然后根据实验结果寻找最优的实验条件。正交设计和均匀设计都属于整体实验设计。

1.4 实验设计的要素与原则

一个完善的实验设计方案应该考虑到如下问题:人力、物力和时间满足要求;重要的观测因素和实验指标没有遗漏并做了合理安排;重要的非实验因素都得到了有效的控制,实验中可能出现的各种意外情况都已考虑在内并有相应的对策;对实验的操作方法、实验数据的收集、整理、分析方式都已经确定了科学合理的方法。

从设计的统计要求看,一个完善的实验设计方案应该符合“三要素”与“四原则”。在讲述实验设计的要素与原则之前,首先介绍实验设计的几个基本概念。

1.4.1 实验设计的要素

从专业设计的角度看,实验设计的三个要素就是实验因素、实验单元和实验效应,其中实验效应用实验指标反映。在前面已经介绍了这几个概念,下面再对有关问题作进一步的介绍。

1. 实验因素

实验设计的一项重要工作就是确定可能影响实验指标的实验因素,并根据专业知识

初步确定因素水平的范围。若在整个实验过程中影响实验指标的因素很多,就必须结合专业知识,对众多的因素作全面分析,区分哪些是重要的实验因素,哪些是非重要的实验因素,以便选用合适的实验设计方法妥善安排这些因素。

因素水平选取得过于密集,实验次数就会增多,许多相邻的水平对结果的影响十分接近,将会浪费人力、物力和时间,降低实验的效率;反之,因素水平选取得过于稀少,因素的不同水平对实验指标的影响规律就不能真实地反映出来,就不能得到有用的结论。在缺乏经验的前提下,可以先做筛选实验,选取较为合适的因素和水平数目。另外,因素的水平取值也受实验条件的限制。例如,当一个加热炉温度波动为 $\pm 10^{\circ}\text{C}$,则两个水平间数值之差为 10°C 一定是不合理的。如果加热炉温度波动为 $\pm 1^{\circ}\text{C}$,则两个水平间数值之差为 10°C 理论上是合理的。

实验的因素应该尽量选择为数量因素,少用或不用品质因素。数量因素就是对其水平值能够用数值大小精确衡量的因素,例如温度、容积等;品质因素水平的取值是定性的,如药物的种类、设备的型号等。数量因素有利于对实验结果作深入的统计分析,例如回归分析等。在出现品质因素时,尽可能采用模糊数学方面的知识将其水平转化为数值。

在确定实验因素和因素水平时要注意实验的安全性。某些因素水平组合的处理可能会损坏实验设备(例如高温、高压)、产生有害物质,甚至发生爆炸。这需要参加实验设计的专业人员能够事先预见,排除这种危险性处理,或者做好预防工作。

2. 实验单元

接受实验处理的对象或产品就是实验单元。在工程实验中,实验对象是材料和产品,只需要根据专业知识和统计学原理选用实验对象。在医学和生物实验中,实验单元也称为受试对象,选择受试对象不仅要依照统计学原理,还要考虑生理和伦理等问题。仅从统计学的角度看需要考虑以下问题:

(1) 在选择动物为受试对象时,要考虑动物的种属品系、窝别、性别、年龄、体重、健康状况等差异。

(2) 在以人作为受试对象时,除了考虑人的种族、性别、年龄、体重、健康状况等一般条件外,还要考虑社会背景,包括职业、爱好、生活习惯、居住条件、经济状况、家庭条件和心理状况等。

这些差异都会对实验结果产生影响,这些影响是不能完全被消除的,可以通过采用随机化设计和区组设计而降低其影响程度。

3. 实验效应

实验效应是反映实验处理效果的标志,它通过具体的实验指标来体现。与对实验因素的要求一样,要尽量选用定量的实验指标,不用定性的实验指标。另外要尽可能选用客观性强的指标,少用主观指标。有一些指标的来源虽然是客观的(如读取病理切片等),但是在判断上也受主观影响,称为半客观指标,对这类半客观指标一定要事先规定所取数值的严格标准,必要时还应进行统一的技术培训。

1.4.2 实验设计的四原则

费希尔在实验设计的研究中提出了实验设计的三个原则,即随机化原则、重复原则和局部控制原则。半个多世纪以来,实验设计得到迅速的发展和完善,这三个原则仍然是指

导实验设计的基本原则。同时,人们通过理论研究和实践经验对这三个原则也给予进一步的发展和完善,把局部控制原则分解为对照原则和区组原则,提出了实验设计的四个基本原则:随机化原则、重复原则、对照原则和区组原则。目前,这四大实验设计原则是已经被人们普遍接受的保证实验结果正确性的必要条件。同时,随着科学技术的发展,这四大原则的内容也在不断发展完善之中。

随机化原则是指每个处理以概率均等的原则,随机地选择实验单元。例如有 A、B 两种热处理方式,将 30 件试样分为两组,A 组 10 只,B 组 20 只。在实际分组时可以采用抽签的方式,把 30 件试样按任意的顺序编为 1~30 号,用外形相同的纸条写出 1~30 个号码,从中随机抽取 10 个号码,对应的 10 件试样分给 A 组,其余 20 件分给 B 组。

重复原则是指相同实验条件下的独立重复实验的次数要足够多。例如测金属材料的硬度时,科研人员一般会测 3 个点以上求平均,这就是一种重复原则的应用。由于个体差异等影响因素的存在,同一种处理对不同的受试对象所产生的效果不尽相同,其具体指标的取值必然有高低之分。只有在大量重复实验的条件下,该处理的真实效应才会比较确定地显露出来。因此在实验研究中必须坚持重复原则。重复通常有三层含义:重复实验、重复测量和重复取样。

对照原则是指在实验中设置与实验组相互比较的对照组,给各组施加不同的处理,然后分析比较结果。对照的形式有多种,可根据研究目的和内容加以选择,常用的有空白对照、实验条件对照、标准对照、自身对照、历史对照和中外对照。

区组原则是指将人为划分的时间、空间、设备等实验条件纳入到实验因素中。如在测试材料抗拉强度时各个型号的万能实验机存在一定的差异,如果在设计实验方案时也考虑万能实验机型号的影响则是采用了区组原则。另外,通常把人为划分的时间、空间、设备等实验条件称为区组。

实验设计的四个原则之间有密切的关系,区组原则是核心,贯穿于随机化、重复和对照原则之中,相辅相成、互相补充。有时仅把随机化、重复和对照称为实验设计的三个原则,这并不是意味着区组不是重要的原则,而是说区组是贯穿于这三个原则之中的一个原则。

1. 区组原则与随机化原则的关系

按照实验中是否考察区组因素,随机化设计分为完全随机化设计和随机化区组设计两种方式。

完全随机化设计中每个处理随机地选取实验单元,这种方式适用于实验的例数较大或实验单元差异很小的情况。例如 AZ91D 镁合金不同表面处理对其耐腐蚀性能影响的实验中,把从镁合金压铸件上切割下来的 100 块试样,对无表面处理、合金化学镀、阳极氧化、微弧氧化这 4 种处理,每种处理随机地选出 25 块试样作为实验单元。在具体实施随机化分组时,仍然可以采用抽签的方法,把 100 块试样按任意顺序从 1~100 编号,用外形相同的纸条写好 1~100 个号码。首先随机地抽出 25 个号码,这 25 个号码对应的试样分配给第 1 个处理。然后再从剩余的 75 个号码中随机抽出 25 个号码,对应的试样分配给第 2 个处理。再从剩余的 50 个号码中随机抽出 25 个号码,对应的试样分配给第 3 个处理。最后剩余的 25 个试样分配给第 4 个处理。有些实验的实验单元之间本身差异很小或不能事先判断其差异。例如考察某种铸件的抗冲击力实

验,用几个不同的冲击力水平对铸件做实验,铸件的抗冲击力不能事先判断,只能采用完全随机化方法分配实验单元。

在大豆施氮肥的4个水平的实验中,如果实验地块仅分为16块,这时采用完全随机化设计,不同处理所分配到的地块土壤的性状就会好坏不均从而导致实验的结果不真。这时就要采用随机化区组设计,使好地块和差地块在几个处理中均衡分配。在这个实验中地块的好坏是区组因素,按照随机化区组设计的要求在选取的16个实验地块中要分别包含8个好地块和8个差地块。4个施肥量的处理分别随机选取2个好地块和2个差地块。这种方式就是随机化区组设计,其目的就是把性状不同的实验单元均衡地分配给每个处理。

实验的各处理和各区组内的实验次数都相同时称为平衡设计。平衡设计也是实验设计的一个基本思想,这样做有利于实验数据的统计分析。

2. 区组原则与重复原则的关系

重复是指在相同条件下对每个处理所做的两次或两次以上的实验,其目的是消除并估计实验的误差。实验的重复次数和区组因素有关,例如前面的大豆施肥量的实验中实验地块分为16块,如果不考虑地块好坏的区组因素时4种施肥量的处理中每个处理都分配到4个实验地块,重复次数为4次;如果考虑地块好坏的区组因素,按随机化区组设计方法每个处理都分配到2个好地块和2个差地块,是重复次数为2次的重复实验;如果地块好坏这个区组因素按照好、一般、差和很差分为4个水平,这时按照随机化区组设计每个处理中分配到的好、一般、差和很差的地块都是各有1个,就是无重复的实验了。

3. 区组原则与对照原则的关系

区组原则与对照原则之间既有相同点也有差异。

区组原则与对照原则的相同点:同属于费希尔提出的局部控制原则,都是将实验单元按照某种分类标准进行分组,使同组内的实验单元尽量接受同样的处理,以减少组内实验条件的差异。

区组原则与对照原则的差异:从适用的范围看,对照原则仅针对比较实验,而区组原则既适用于比较实验也适用于优化实验。从实验中的作用看,比较实验的目的就是检验处理组和对照组之间是否有显著差异,如前面所述,对照组可以看作处理因素的一个水平,例如,AZ91D镁合金不同表面处理中没处理就是空白对照组。在统计分析中,对照组的比较实验属于单因素实验。而区组因素看作是影响实验指标的其他因素,与实验因素共同构成多因素实验。因此在统计分析中,区组设计属于两因素或多因素实验。另外,在考虑区组因素的比较实验中,处理组和对照组要按照相同的区组因素分配实验单元,这样实验结果才有可比性。

1.5 实验设计中的误差控制

1.5.1 实验误差

在实验过程中,环境、实验条件、设备、仪器、实验人员认识能力等原因,使得实验测量的数值和真值之间存在一定的差异,这就是误差。误差可以逐渐减小,但不能完全消除,

即误差的存在具有普遍性和必然性。在实验设计中应尽量控制误差,使其减小到最小程度,以提高实验结果的精确性。

误差按其特点与性质可分为三种:系统误差,随机误差,粗大误差。

1. 系统误差

系统误差是由于偏离测量规定的条件,或者测量方法不合适,按某一确定的规律所引起的误差。在相同实验条件下,多次测量同一量值时,系统误差的绝对值和符号保持不变;或者条件改变时,按一定规律变化。例如,标准值的不准确、仪器刻度的不准确而引起的误差都是系统误差。

系统误差是由按确定规律变化的因素所造成的,这些误差因素是可以掌握的。

具体来说,有以下4个方面的因素。

(1) 测量人员:由于测量者的个人特点,在刻度上估计读数时,习惯偏于某一方向:动态测量时,记录某一信号,有滞后的倾向。

(2) 测量仪器装置:仪器装置结构设计原理存在缺陷,仪器零件制造和安装不正确,仪器附件制造有偏差。

(3) 测量方法:采取近似的测量方法或近似的计算公式等引起的误差。

(4) 测量环境:测量时的实际温度对标准温度的偏差,测量过程中温度、湿度等按一定规律变化的误差。

对系统误差的处理办法是发现和掌握其规律,然后尽量避免和消除。

2. 随机误差(或称偶然误差)

在同一条件下,多次测量同一量值时,绝对值和符号以不可预定方式变化着的误差,称为偶然误差。即对系统误差进行修正后,还出现观测值与真值之间的误差。例如,仪器仪表中传动部件的间隙和摩擦,连接件的变形等引起的示值不稳定等都是偶然误差。这种误差的特点是在相同条件下,少量地重复测量同一个物理量时,误差有时大有时小,有时正有时负,没有确定的规律,且不可能预先测定。但是当观测次数足够多时,随机误差完全遵守概率统计的规律。即这些误差的出现没有确定的规律性,但就误差总体而言,却具有统计规律性。

随机误差是由很多暂时未被掌握的因素构成的,主要有三个方面。

(1) 测量人员:瞄准、读数的不稳定等;

(2) 测量仪器装置:零部件、元器件配合的不稳定,零部件的变形,零件表面油膜不均、摩擦等;

(3) 测量环境:测量温度的微小波动,湿度、气压的微量变化,光照强度变化,灰尘、电磁场变化等。

因而随机误差是实验者无法严格控制的,一般是不可完全避免的。

3. 粗大误差

明显歪曲测量结果的误差称为粗大误差(或称过失误差)。例如,测量者在测量时错了标志、读错了数、记错了数等。凡包含粗大误差的测量值称为坏值。只要实验者加强工作责任心,粗大误差是可以完全避免的。

发生粗大误差的原因主要有两个方面。

(1) 测量人员的主观原因:由于测量者责任心不强,工作过于疲劳,缺乏经验操作不