现代试验设计优化方法及应用

XIANDAI SHIYAN SHEJI YOUHUA FANGFA JI YINGYONG

马成良　张海军　李素平　编著

郑州大学出版社

现代试验设计优化方法及应用

XIANDAI SHIYAN SHEJI YOUHUA FANGFA JI YINGYONG

马成良　张海军　李素平　编著

郑州大学出版社

内容提要

本书主要介绍科学研究、工程技术与管理中常用的现代试验设计、分析方法及其应用，包括误差理论、方差分析、回归分析、因子设计、正交试验设计、稳健设计、模式识别、分形、人工神经网络、蒙特卡洛模拟等内容以及数据处理软件应用的介绍。本书可作为理工类和管理类相关专业的大学生、研究生教材，也可作为科研人员、工程管理技术人员和教师参考用书。

图书在版编目(CIP)数据

现代试验设计优化方法及应用/马成良，张海军，李素平编著．—郑州：郑州大学出版社，2007．9
ISBN 978－7－81106－691－3

Ⅰ．现…　Ⅱ．①马…②张…③李…　Ⅲ．①试验设计(数学)－最佳化②试验设计(数学)－应用　Ⅳ．O212．6

中国版本图书馆CIP数据核字(2007)第118600号

郑州大学出版社出版发行
郑州市大学路40号　　邮政编码：450052
出版人：邓世平　　发行部电话：0371－66966070
全国新华书店经销
河南龙华印务有限公司印制
开本：710 mm×1 010 mm　　1/16
印张：21.5
总字数：375千字
版次：2007年9月第1版　　印次：2007年9月第1次印刷

书号：ISBN 978－7－81106－691－3　　定价：29.00元

前 言

试验设计及其优化是当代科学研究、工程技术与管理中得到广泛应用的一门学科，也是数理统计学的应用方法之一。在农业、冶金、材料、化工、机械电子、交通运输等各多个行业以及经营管理和科学研究等各个领域，都得到了广泛的应用和发展，并取得了显著的成绩和非常可观的经济效益。

本书讲稿曾作为郑州大学“应用数学——试验设计、分析与数据处理”课程的内部教材使用，效果较好。为满足更多读者学习的需要，应当有一本合适的正式教材出版，因此在原讲稿基础上经过补充、完善，我们编写了此书。本书编写分工为：马成良编写第三~七章，张海军编写第九~十三章，李素平编写第一、二、八章。

在本书编写过程中，参考了国内外的相关书籍、期刊和资料（主要参考文献列于书中各章末），引用了其中的一些内容和实例，在此向这些作者和译者表示诚挚的谢意。

郑州大学教务处、研究生院、材料科学与工程学院、高温材料研究所和郑州大学出版社对本书的出版给予了热情的支持和帮助，特借此表示衷心的感谢。

本书在编写中，力求理论联系实际，结合实例说明基本原理和方法。但由于编者水平有限，书中可能仍有不妥之处，敬请读者批评指正。

编 者

2007 年 4 月 8 日

目 录

第一章　误差理论和测量结果表达 1

第一节　误差的分类及其相互转化 2

第二节　准确度、精密度和精确度 5

第三节　有效数字与数字的修约 5

第四节　随机误差的统计特性 6

第五节　正态分布与几种重要的非正态分布 10

第六节　样本异常值的判断和处理 20

第七节　测量结果的区间估计 27

第二章　统计推断和显著性检验 30

第一节　数理统计的基本概念 31

第二节　假设检验的基本思路和方法 33

第三节　总体均值的显著性检验 38

第四节　总体方差的统计检验 46

第三章　方差分析 51

第一节　单因素试验的方差分析 51

第二节　双因素试验的方差分析 57

第四章　回归分析与曲线拟合 70

第一节　线性回归 70

第二节　非线性回归 80

第三节　曲线拟合　85

第五章　因子设计　93
第一节　因子设计的概念　93
第二节　2^k因子设计　95
第三节　3^k因子设计　111

第六章　正交试验设计　121
第一节　正交表及其用法　122
第二节　多指标正交试验的分析方法　127
第三节　混合水平的正交试验设计　132
第四节　有交互作用的正交试验设计　137
第五节　正交试验设计的方差分析　140
第六节　正交试验设计中的效应计算与指标值的预估计　159

第七章　稳健设计　169
第一节　概述　169
第二节　信噪比及其应用　170
第三节　稳健设计的步骤及实例　174

第八章　数学模型方法　187
第一节　基本概念　187
第二节　建模的一般步骤　189
第三节　人口的控制与预测　191
第四节　轧钢中的浪费　199
第五节　药物在体内的分布与排除　203

第九章　逐步回归分析原理及应用　209
第一节　回归分析方法　209
第二节　逐步回归分析方法在农业生产中的应用　222
第三节　逐步回归分析方法在制备矾土基 β－Sialon 结合刚玉复合材料中的应用　225
第四节　应用逐步回归分析预测居民银行存款　231

第十章　模式识别原理及其应用 235
第一节　统计模式识别方法 236
第二节　主成分分析法模式识别(PCA)程序设计 241
第三节　结构化主成分分析法模式识别(PCA)程序在合成莫来石工艺研究中的应用 248
第四节　主成分分析法在 O′-Sialon 合成过程中的应用 253
第五节　模式识别优化算法在环保方面的应用 257

第十一章　人工神经网络、遗传算法原理及应用 261
第一节　人工神经元网络技术 261
第二节　人工神经元网络应用实例 266
第三节　遗传算法 272
第四节　遗传算法在科学研究中的应用 278

第十二章　分形理论及其应用 287
第一节　分形几何学及其研究方法 287
第二节　分形理论在材料制备科学中的应用 291
第三节　分形理论在生物学中的应用 297
第四节　分形理论在地球物理学中的应用 299

第十三章　蒙特卡洛模拟基础及应用 302
第一节　蒙特卡洛方法概述 302
第二节　随机数与伪随机数 305
第三节　任意分布的随机变量的抽样 309
第四节　蒙特卡洛计算中减少方差的技巧 313
第五节　蒙特卡洛方法在水稻单产变化预测中的应用 318

附录 325
附录 1　拉普拉斯函数表 325
附录 2　t 分布临界值表 326
附录 3　χ^2 分布表 327
附录 4　F 检验的临界值(F_α)表 329

第一章
误差理论和测量结果表达

在工农业生产、科学研究、国防建设及国民经济各部门，都离不开各种测量。许多物理定律的发现、物理常数的确定，都是通过精密计量测试得出的，如：半导体的发现、自由落体定理的确定等；一些理论的进一步完善也是通过测量进行的，如：吴有训和康普顿研究了X射线频率和散射角的关系，通过对散射光角度改变及波长改变的测量，证实了以前理论分析的正确性，奠定了量子理论基础——光量子能量守恒和冲量守恒定律；对于技术科学，测量尤为重要，它是发展技术和工业的必要条件，并永远是促进技术科学进步的重要因素。测量的精度和效率，决定着科学技术和工业的水平。由于实验方法和实验设备的不完善、周围环境的影响以及受人们认识能力所限等，测量和实验所得数据与被测量的真值之间，不可避免地存在着差异，这在数值上表现为误差。随着科学技术的日益发展和人们认识水平的不断提高，虽可将误差控制得越来越小，但终究不能完全消除它。误差存在的必然性和普遍性已为大量实践所证明，为了充分认识并进而减小误差，必须对测量过程和科学实验中始终存在着的误差进行研究。

误差理论就是科学地、确切地对测量结果进行评价的理论。掌握误差理论的有关知识，可以对所进行的各种测量做进一步的理解，并对测量结果作出科学的评价。若所进行的测量具有一定的精度，则要根据测量误差的需要来确定如何安排测量、需要进行几次测量、对测得值应如何进行处理、用什么形式给出测

量结果的最佳表达式等。

第一节　误差的分类及其相互转化

所谓误差，就是测量值与被测量的真值之间的差，可表示为

$$误差 = 测量值 - 真值$$

若令测量误差为δ，测量值为x，真值为x_0，则有

$$\delta = x - x_0 \tag{1.1}$$

但实际上真值x_0是未知的，因而真差也无法获知。由于在有限次测量时得到的是有限个测量值$x_1, x_2, \cdots, x_n$，并可从该组测量值计算出最接近于真值x_0的算术平均值$\bar{x}$，所以就用$\bar{x}$代替x_0来计算误差，该误差量叫做残余误差，简称残差，因此各测量值的残差v_i可用下式表示：

$$v_i = x_i - \bar{x} \tag{1.2}$$

$$\bar{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i \tag{1.3}$$

一、误差的分类

一般说来，测量值的误差随着测量次数或测量时刻的不同而不同，或者改变某一条件因素后误差也不一样，根据误差的这些不同特性，也为了便于今后研究和处理误差，人们将误差划分为系统误差、随机误差和粗大误差三类。

（一）系统误差

定义：在同一条件下，多次测量同一量值时，绝对值和符号保持不变的误差；或在条件改变时，按一定规律变化的误差，称为系统误差。

所谓一定的规律，意思是：这种误差可以归结为某一个因素或某几个因素的函数，这种函数一般可用解析公式、曲线或数表的形式来表达。

实验或测量条件一经确定，系统误差就获得一个客观上的恒定值，多次测量的平均值也不能减弱它的影响。改变实验条件，就能够发现系统误差随之变化的规律，例如，依次改变温度就能够发现系统误差随温度而变化的规律，这是用物理的方法发现系统误差的措施。实质上，在多种实验条件中，系统误差就是这

些实验条件因素的函数，是随着实验条件的改变而变化的误差，但这种变化具有确定的规律性。

各项研究工作都具有阶段性，我们对误差的研究也不例外。因此，对于较主要的系统误差研究得比较深透，规律性掌握得比较好；而对于次要的系统误差，或者需要花费更高代价和时间研究的暂时为次要矛盾的系统误差，可能掌握得不好或者未掌握其规律性。于是，根据对系统误差掌握的程度，可将其分为已定系统误差和未定系统误差两种。

(1)已定系统误差　误差的方向已知，绝对值已知，若其数值为 ε，则 ε 本身带有符号。

(2)未定系统误差　误差的方向未知，绝对值未知，通常可以估计其界限为 e。

按误差出现的规律，系统误差又可分为不变系统误差和变化系统误差。

(1)不变系统误差　误差绝对值和符号为固定的。

(2)变化系统误差　误差绝对值和符号为变化的，如线性、周期性、复杂规律性。

(二)随机误差

定义：在同一测量条件下，多次测量同一量值时，绝对值和符号以不可预知方式变化着的误差，称为随机误差。

例如，仪器仪表中传动部件的间隙和摩擦、连接件的弹性变形等引起的示值不稳定。

由于随机误差在各项测量中的单个无规律性，导致了众多随机误差之和有正负相消的机会，随着测量次数的增加，随机误差的个数也增加，而随机误差平均值越来越小并以零为极限，因此，多次测量的平均值的随机误差比单个测量值的随机误差小，这种性质通常称为随机误差的抵偿性。随机误差的抵偿性只发生在本次实验过程中产生的许多随机误差中，所以也称为本次随机误差。

由于随机误差的变化不能预先确定，所以这类误差不能修正，而仅仅只能估计而已。以后将会看到，随机误差是具有统计(或概率)规律的误差。

(三)粗大误差

定义：超出在规定条件下预期的误差称为粗大误差，或称寄生误差。

例如，测量时对错了标记、将 3 读为 4、将 7 记为 1，等等。

又如,实验状况末达到预想的指标(如真空度末达到要求)而匆忙实验等都会带来粗大误差。

含有粗大误差的测量值会明显地歪曲客观现象,故含有粗大误差的测量值称为坏值或异常值。

要采用的测量结果不应该包含粗大误差,即所有的异常值都应当剔除不要。所以,在作误差分析时,要估计的误差通常只有系统误差和随机误差两类。

二、误差的相互转化

值得注意的是,误差的性质是可以在一定的条件下相互转化的。

对某项具体误差,在此条件下为系统误差,而在另一条件下就可能为随机误差,反之亦然。如按一定基本尺寸制造的量块,存在着制造误差,对某一块量块的制造误差是确定数值,可认为是系统误差,但对一批量块而言,制造误差是变化的,又成为随机误差;在使用某一量块时,没有检定出该量块的尺寸偏差,而按基本尺寸使用,则制造误差属随机误差。若检定出量块的尺寸偏差,按实际尺寸使用,则制造误差属系统误差。

掌握误差转化的特点,可将系统误差转化为随机误差,用数据统计处理方法减小误差的影响;或将随机误差转化为系统误差,用修正方法减小其影响。

又如,度盘某一分度线只有一个恒定系统误差,但所有各分度线的误差却有大有小,有正有负,对整个度盘的分度线的误差来说具有随机性质,如果用度盘的固定位置测量定角,则误差恒定;如果用度盘的各个不同位置测量该角,则误差时大时小,时正时负,就随机化了。因而,测量平均值的误差能够得到减小,这种办法常称之为随机化技术。

在实际的科学实验与测量中,人们常利用这些特点,以减小实验结果的误差。譬如,当实验条件稳定且系统误差可掌握时,就尽量保持在相同条件下做实验,以便修正掉系统误差;当系统误差未能掌握时,就可以采用随机化技术,例如:均匀改变测量条件(如度盘位置)使系统误差随机化,以便得到抵偿部分系统误差后的结果。

总之,随着对误差性质认识的深化和测试技术的发展,有可能把过去作为随机误差的某些误差分离出来作为系统误差处理,或把某些系统误差当作随机误差来处理。

第二节 准确度、精密度和精确度

习惯上所说的精度，通常是指误差而言的。例如，实验相对误差为0.01%，则说其精度为0.01%或1×10^{-4}，但是这个误差值是随机误差部分，还是系统误差部分，或者是系统误差与随机误差的叠加，这些从含义笼统的“精度”一词上得不到明确的反映。

为了明确回答误差具有的性质，上述误差如果纯属随机误差引起，则说其精密度为10^{-4}；如果由系统误差引起，则说其准确度为10^{-4}；如果由系统误差和随机误差共同引起的，则可说其精确度为10^{-4}，由此可见，“精度”一词可以明确叙述为：

(1)准确度　表示测量结果中系统误差的影响程度。

(2)精密度　表示测量结果中随机误差的影响程度。

(3)精确度　表示测量结果中系统误差和随机误差综合的影响程度。其定量特征可用测量的不确定度(或极限误差)来表示。

既然几个“度”都是与误差相联系的，那么称之为不准确度是否更好些呢?

从本质上来说，这些称呼都是一样的，只不过准确度是反映测量结果与真值的一致程度，即测量结果向真值靠近的程度；而不准确度则是描述了测量结果离开真值的程度，它们在数值上都可以用误差这个较小的数值表示，因为用较小的值表达比较方便。

对试验或测量来说，精密度高的准确度不一定高，准确度高的精密度不一定高，但精确度高的，精密度与准确度都高。

第三节 有效数字与数字的修约

任何测量数据都含有测量误差，多取数据的位数，并不一定能减小测量误差，相反，还有可能会使计算复杂，并造成误解。因此，测量数据的位数应与其测量误差相适应。

根据相对误差确定有效数字的关系式为

$$(Z+1)E_x \leqslant 10^{-S} \tag{1.4}$$

式中：Z——第一位数字；

E_x——相对误差；

S——指数的最大值。

有效数字与 S 的关系是：有效数字 $=S+1$。

当第一位数字甚小时，可以增加一位有效数字；当数值是多次测量的平均值时，可以增加一位有效数字。

例 1.1 某观测值的测定值为 0.238 6，已知相对误差为 0.5%，估计其有效数字。

解 $Z=2$，$E_x=0.005$，$(Z+1)E_x=3\times0.005=0.015=1.5\times10^{-2}$，因为 $0.01<0.015<0.1$ $(0.1=10^{-1})$，所以 $S=1$，有效数字为 2，此测量值应取两位有效数字，写为 0.24。由于第一位数字是 2，很小，所以有效数字也可增加一位，写为 0.239。

测量结果应保留的位数原则是：其最末一位数字是不可靠的，而倒数第二位数字应是可靠的。

在试验数据处理时，首先确定有效数字的位数，当有效数字的位数确定之后，例如为 N 位，再对 $N+1$ 位后的数字进行修约，即舍入。

过去习惯用"四舍五入法"，其实，这样做有一个缺点，因为"四舍五入"遇 5 就进位，很容易使所得的数据系统偏高，无法消除由 5 本身引起的误差，如果有的 5 入，有的 5 舍，就可以使 5 本身引起的正负误差相消。"四舍六入五单双法"的数字修约规则就解决了这个问题。"四舍六入五单双法"的具体内容是：四舍六入五考虑；五后非零则进一；五后皆零视奇偶，五前为奇则进一，五前为偶应舍去。

第四节 随机误差的统计特性

为了研究随机误差的特性，先研究一个实例。

表 1.1 是一学生测定某轴直径的 84 个数据，乍看起来似乎杂乱无章，毫无规律可言，然而，若将这些数据进行适当整理、合理分组并画出数据的频数图后就

会发现,这些数据间存在独特的规律性。

表 1.1 测定某轴直径尺寸时的数据

(mm)

直径尺寸						
10.60	10.74	10.70	10.57	10.55	10.66	10.62
10.67	10.65	10.65	10.59	10.52	10.63	10.61
10.67	10.64	10.68	10.62	10.49	10.54	10.65
10.64	10.61	10.66	10.60	10.56	10.66	10.61
10.58	10.65	10.69	10.53	10.57	10.61	10.64
10.64	10.69	10.70	10.56	10.61	10.64	10.63
10.67	10.64	10.70	10.58	10.61	10.64	10.54
10.62	10.63	10.60	10.63	10.61	10.62	10.61
10.57	10.67	10.65	10.58	10.50	10.62	10.60
10.60	10.70	10.70	10.59	10.53	10.65	10.64
10.59	10.63	10.70	10.61	10.53	10.60	10.65
10.61	10.62	10.63	10.62	10.59	10.63	10.59

频数分布图的做法如下:先将全部数据(表中)依其大小重新排列,并按一定间隔分成若干组,为避免某数据恰好落在分点上,通常应使分点比原测定精度多出一位有效数字。本例数据中最大值是 10.74 ,最小值是 10.49,所以,本例分成 9 组,组距为 0.03 mm,结果见表 1.2。

表 1.2 频数、频率分布表

组次	分组区间	频数	组频率
1	10.485 ~ 10.515	2	0.024
2	10.515 ~ 10.545	6	0.071
3	10.545 ~ 10.575	6	0.071
4	10.575 ~ 10.605	14	0.167

续表

组次	分组区间	频数	组频率
5	10.605 ~ 10.635	22	0.262
6	10.635 ~ 10.665	20	0.238
7	10.665 ~ 10.695	7	0.083
8	10.695 ~ 10.725	6	0.071
9	10.725 ~ 10.755	1	0.012

为了更加直观地看出这些数据中所表现出的特殊的规律性，可在横坐标上标出各分组的分点（横坐标 x 代表所测轴径尺寸），纵坐标对应频数，横坐标对照组距，画出以频数为高度的矩形，它就是频数分布直方图，见图 1.1。图 1.2 是频率分布直方图。

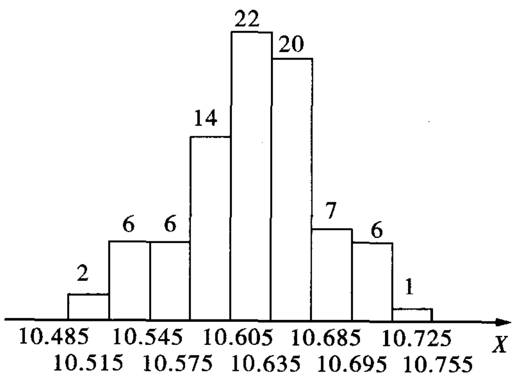

图 1.1　轴径测量值的频数分布直方图

由频数、频率分布直方图可以看出，从表面上看来似乎是杂乱无章的数据有其内在规律，由全部数据来看，有明显集中趋势，大多数数据集中在算术平均值 $\bar{x}$ 附近，即具有误差各不相同的数据都围绕着 $\bar{x}$ 近旁波动。频数和频率分布直方图是研究随机数据规律性的一种重要工具。如果在同样测试条件下再重新测定 84 次，再按上述方法作图后就会发现，它与第一组的处理结果有差异，但差异很小。如果把这两组数据混编在一起，就组成了 84 + 84 = 168 次的另一子样，由它得出的频率、频数直方图，又会与前两组的结果不同，但形状相似。

当逐步增加子样的容量并相应增加组数后，各组内频率将逐渐以某个确定

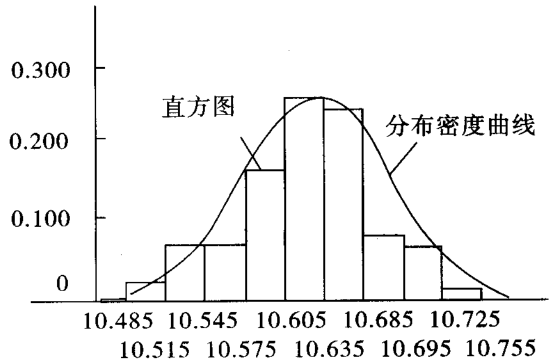

图 1.2　轴径测量值的频率分布直方图

数值稳定下来，直方图也渐趋于一条较为光滑的曲线。当子样容量趋于无穷大时，测定值将连续地充满数轴（横轴）的某一区间，这时各组内的频率就是其概率值，该曲线也将演变成一条光滑曲线，称作概率密度分布曲线。正态分布是连续型随机变量的一种理论分布，在大多数情况下，各种不同量值的误差分布大都服从正态分布。

从上面例子的直方图 1.1 我们可以看到，随机误差主要有以下几方面的性质：

（1）在一定测量条件下的有限测量值中，其随机误差的绝对值不会超过一定的界限，误差所具有的这个特征，我们称之为有界性。

（2）绝对值相等的正误差与负误差出现的次数大致相等，这一特性称为对称性。

（3）绝对值小的误差出现的次数比绝对值大的误差出现的次数多，这一特性称为单峰性。

（4）对同一量进行多次测量，其误差的算术平均值随着测量次数 n 的无限增加而趋于零，即误差平均值的极限为零，这称为误差的抵偿性。

抵偿性是随机误差的最本质的统计特性，也可以说，凡具有抵偿性的误差，原则上都可按随机误差处理。

产生这类误差的原因是多种因素的微小变化的共同影响，很难说哪一项因素最主要，它们分别引起的误差都非常小，而且交错变化，时大时小，这类因素称为随机因素，影响测量值产生的误差就是随机误差，它们在概率论中就抽象为中

心化的随机变量。对单个误差来说,不具有任何确定的规律,就误差的整体来说,都具有统计规律。由于大多数随机误差都服从正态分布,因而正态分布理论成为研究随机误差的基础。

第五节　正态分布与几种重要的非正态分布

一、正态分布

(一)正态分布简介

正态分布也称高斯(Gauss)分布,它是随机误差的一种重要分布。实践表明,在大多数情况下,在测量过程中产生的误差是服从正态分布的。概率论的中心极限定理从理论上说明了上述现象的必然性,该定理指出:“有许多随机变量,它们受到大量相互独立的随机因素的影响,而每一个别因素在总的影响中所起的作用可以看做是非常小,那么,这类随机变量应该是服从或近似服从正态分布”。

正态分布的概率密度函数 $p(x)$ 的表达式如下:

$$p(x)=\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\exp\left[\frac{-(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right] \tag{1.5}$$

式中:$p(x)$——概率密度;

x——随机变量;

σ——总体标准差;

σ^2——总体方差;

μ——理论均值或随机变量 x 的数学期望。

σ^2、σ、μ 的计算公式如下:

$$\sigma^2=\int_{-\infty}^{+\infty}(x-\mu)^2p(x)\,\mathrm{d}x \tag{1.6}$$

$$\sigma=\sqrt{\int_{-\infty}^{+\infty}(x-\mu)^2p(x)\,\mathrm{d}x} \tag{1.7}$$

$$\mu=\int_{-\infty}^{+\infty}xp(x)\,\mathrm{d}x \tag{1.8}$$