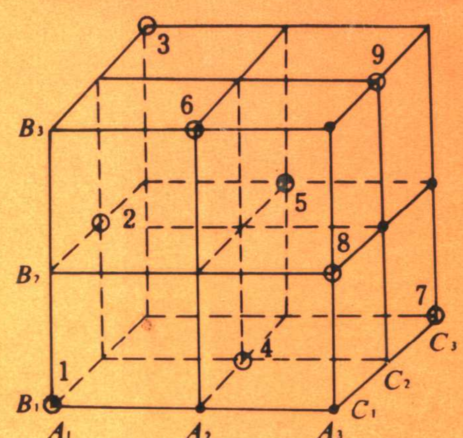
何为
陈际达 编

优化试验设计法及其在化学中的应用



电子科技大学出版社

[川]新登字 016 号

本书介绍了目前最常用、最有效的几种试验设计法的基本原理及在化学试验中的应用。书中内容包括：正交实验法、优选法基础、回归分析法、正交多项式回归法、均匀设计法、单纯形法及鲍威尔优化法。

本书可适用高等学校高年级学生、研究生教材，也可供科研人员及工程技术人员参考。

优化试验设计法及其在化学中的应用

何为　陈际达　编

*

电子科技大学出版社出版

（成都建设北路二段四号）邮编 610054

电子科技大学出版社印刷厂印刷

四川省新华书店经销

*

开本 787×1092　1/16　印张 17.125　字数 317 千字

版次　1994 年 12 月第一版　印次　1994 年 12 月第一次印刷

印数 1—2000 册

中国标准书号　ISBN 7-81043-167-6/O・14

定价：　8.80 元

绪　言

优化试验设计方法是一种通用技术。目前许多工业发达国家在理、工、农、医等各个领域都得到广泛的应用。它们在提高实验效率、优化产品设计、改进工艺技术、强化质量管理等方面的应用均取得了显著效果。

优化试验设计方法是尽可能少做实验；尽快地找到生产和科研的最优方案的方法。它是一种现代的科学试验设计方法。过去总是夸耀某人花了几十年的功夫，做了几百次、甚至几千次的试验，获得了某一科研成果。自从40年代初数学上的最优化理论的出现，应用该数学原理安排试验而出现了优化试验设计方法后，我们就要反问一句，是否有必要做那么多次试验，花那么长的时间才获得某一成果。当然花几十年搞试验的精神和毅力是令人敬佩的，可是用优化试验设计方法搞几十年就可以取得更多、更好的成果。

我国在此领域起步较晚，大约在70年代初，由我国著名数学家华罗庚教授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，虽然也在生产上应用，但并没有引起广泛的重视。到了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验法、回归分析法、正交多项式回归法、均匀设计法、单纯形法及鲍威尔方法等，应用范围更加广泛，更为有效，本书对这些方法都作了详尽的论述。

目前，我国在一些高校及科研机构也逐步重视并运用优化试验设计方法，但尚不普遍。因此在80年代后期我国一些著名学者也纷纷公开发表优化试验设计方法的系列讲座方面的文章介绍这些方法的原理和应用，并呼吁全国各行、各业掌握并加以应用优化试验设计方法这项通用技术。应用该项通用技术科学地安排试验，可以以最少的人力、物力消耗取得更多、更好的科研成果。

我国目前尚无一本较为全面地介绍优化试验设计方法的书籍。作者从1989年起编写了讲义作为大学化学及材料专业高年级学生及研究生的教材，并在5年的教学和科研中得到充实和完善，经5年来的教学和科研的实践证明，取得了令人可喜的成绩。

该书着重介绍了近代发展起来的最常用、最有效的几种优化试验设计方法

及其在化学中的应用。书中的一些应用实例，是作者在科研工作中应用该方法取得的成果。本书还介绍了作者首先将鲍威尔（Powell）方法的原理应用在化学及材料科学所取得的最新研究成果。

该书的内容包括，正交试验法、优选法基础、回归分析法、正交多项式回归法、均匀设计法、单纯形法及鲍威尔（Powell）方法。本书略去了详细的数学理论，着重介绍方法原理、应用范围、优缺点，如何将这些方法应用到化学中，如何运用优化试验设计方法设计要解决化学问题的试验方案，如何设置试验参数，如何处理实验数据、如何估计实验误差，如何对实验的结果的结果进行评价。

该书适用于大学化学专业高年级学生及研究生，也可供其它相关专业的教学、科研人员及工程技术人员参考。电子科技大学化学系何为编写该书的第 1、2、3、4、5、6、7、8、10 章，重庆大学化工学院陈际达编写该书的第 9 章。北京大学化学系邓彧琼对第 10 章的基础理论及实验作了大量工作，在此表示感谢。

由于编者水平有限，错误难免，敬请读者批评指正。

编 者

1994. 12. 1

目　录

第一章　正交试验基本方法

本章通过实例介绍正交试验设计的基本思想。主要介绍对简单多因素试验问题如何运用正交表进行表头设计，以及如何用极差分析法对试验数据进行比较，作出正确的判断。

§1-1　问题的提出—多因素的试验问题

在生产和科研项目中，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，试验次数既多，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—150 分钟

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使转化率高。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：$A_1=80$℃、$A_2=85$℃、$A_3=90$℃

B：$B_1=90$ 分、$B_2=120$ 分、$B_3=150$ 分

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。

（Ⅰ）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。

$A_1B_1C_1$	$A_2B_1C_1$	$A_3B_1C_1$
$A_1B_1C_2$	$A_2B_1C_2$	$A_3B_1C_2$
$A_1B_1C_3$	$A_2B_1C_3$	$A_3B_1C_3$

$A_1B_2C_1$	$A_2B_2C_1$	$A_3B_2C_1$
$A_1B_2C_2$	$A_2B_2C_2$	$A_3B_2C_2$
$A_1B_2C_3$	$A_2B_2C_3$	$A_3B_2C_3$
$A_1B_3C_1$	$A_2B_3C_1$	$A_3B_3C_1$
$A_1B_3C_2$	$A_2B_3C_2$	$A_3B_3C_2$
$A_1B_3C_3$	$A_2B_3C_3$	$A_3B_3C_3$

共有 $3^3=27$ 次试验。

用图 1-1 立方体 27 个节点表示之 27 次试验。这种试验法叫全面试验法。

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。假如，我们还需要对试验的重现性，对试验的误差大小作出估计，则每一个试验至少要重复一次，即应作 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。

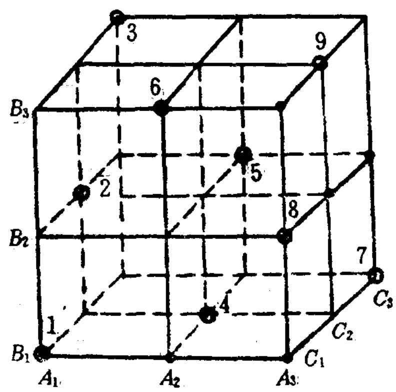


图 1-1 三种试验安排方式

27 个交叉点为全面试验时试验的分布位置

· 简单比较法安排试验点的分布位置

· 正交试验法安排试验时试验点的分布位置

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

$$B_1C_1 \begin{cases} A_1 \\ A_2 \\ \boxed{A_3} \end{cases} \text{（好结果）}$$

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

$$A_3C_1 \begin{cases} B_1 \\ \boxed{B_2} \\ B_3 \end{cases} \text{（好结果）}$$

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

$$A_3B_2 \begin{cases} C_1 \\ \boxed{C_2} \\ C_3 \end{cases} \text{（好结果）}$$

试验结果以 C_2 最好。于是就认为最好的工艺条件是 $A_3B_2C_2$。

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（见图 1-1），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 $A_3B_2C_2$ 不一定 27 个组合中最好的。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，只作 5+（6−1）（5−1）=5+5×4=25 次试验就可以了。

考虑兼顾这两种方法的优点，从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的少，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。这样作出如图 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。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，尚可通过作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，作图的方法就不行了。

试验工作者大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。

用正交表来安排试验及分析试验结果，这种方法叫做正交试验法。

§1-2 用正交表安排试验

一、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、产量等均可做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定量化加以处理。因此，以后我们对二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…表示。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，就叫它是几水平的因素。在例 1-1 中，因素为温度（A），时间（B），碱用量（C）。A_1=80℃，A_2=85℃，A_3=90℃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。

二、正交表符号的意义

每张正交表通常都有各自的记号，$L_8(2^7)$、$L_{16}(2^{15})$、$L_9(3^4)$、$L_{16}(4^2\times2^9)$、$L_{18}(6^1\times3^6)$ 等等。符号 L 代表正交表，L 有下角的数字 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，括号内大写的数字 2、

3、4 等表示因素的水平数。如 L_8（2^7）表示要作 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}（$4^2\times2^9$）表示作 16 个试验，其中最多允许安排二个四水平的因素和九个二水平的因素。

正交表的记号所表示的意义可归纳如下图所示

L（2 ）

正交表的代号

正交表的纵列数
（最多允许安排因素的个数）

字码数（因素的水平数）

正交表的横行数

三、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）（见表 1-1）介绍正交表的正交性如下：

表 1-1　L_8（2^7），L_9（3^4）正交表

试验号＼列号	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

试验号＼列号	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 1-1 知，各因素水平的变化很有规律，按一定顺序变化，各因素出现的次数相同。因此，其它各因素对试验结果的影响基本相同或相近，最大限度

地排除了其它因素的干扰，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。因素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这种特性称为整齐可比性，它是正交试验结果分析的基础，以后还会详细的加以说明。

四、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。

其次确定因素一水平表，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，因素一水平表如下：

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

因素 / 水平	A	B	C
1	A_1	B_1	C_1
2	A_2	B_2	C_2
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。试验方案见表 1-2。

在实施试验时，“横着做”。

具体九次试验如下：

$A_1B_1C_1$　　$A_1B_2C_2$　　$A_1B_3C_3$

$A_2B_1C_2$　　$A_2B_2C_3$　　$A_2B_3C_1$

$A_3B_1C_3$　　$A_3B_2C_1$　　$A_3B_3C_2$

最后进行结果分析(后面会冲列)。

表 1-2　试验方案及试验结果表

试验号 \ 因素(列号)	A 温度(℃) 1	B 时间(分) 2	C 碱用量(x%) 3	4	试验指标 转化率(%)
1	1(80℃)	1(90 分)	1(5%)	1	31
2	1(80℃)	2(120 分)	2(6%)	2	54
3	1(80℃)	3(150 分)	3(7%)	3	38
4	2(85℃)	1(90 分)	2(6%)	3	53
5	2(85℃)	2(120 分)	3(7%)	1	49
6	2(85℃)	3(150 分)	1(5%)	2	42
7	3(90℃)	1(90 分)	3(7%)	2	57
8	3(90℃)	2(120 分)	1(5%)	3	62
9	3(90℃)	3(150 分)	2(6%)	1	64

由上例可得出用正交表安排试验步骤：

（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作几点说明：

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各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

$L_9(3^4)$ 表说明了应作试验的次序，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。那么究竟如如何排水平才更为妥当呢，常用的一种方法叫随机化，即对部分因素水平作随机化排列。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 5 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—水平表见表 1-3，试验方案表见表 1-4。

表 1-3 因素—水平

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

表 1-4　试验方案表

因素（列号）/ 试验号	A 取体积 (ml) 1	B 试剂甲用量 (ml) 2	C 发色温度 (C) 3	D 试剂乙用量 (ml) 4	E 发色时间 (小时)
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。下面以便 1-1 为例介绍一种直观分析法—极差分析法。

我们对表 1-2 的试验结果进行综合比较，在比较中要鉴别的内容是：

(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，那末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 $A_1=80℃$、$A_2=85℃$、$A_3=90℃$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见表 1-5。

表 1-5

试验号 / 列号	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

续表

试验号＼列号	A	B	C
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 1-5 可看出，A_1、A_2、A_3 各自所在的那组试验中，其它因素（B、C、D）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_i，平均值 $k_i=\frac{K_i}{3}$。

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

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

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、D 三个因素的 1、2、3 水平各出现一次（见表 1-5），数据和 K_1^A 反映了三次 A_1 水平的影响和 B、C、D 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、D 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、D 对 K_1^A、K_1^B、K_1^C 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：

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

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

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

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

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

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

从表1-6可看出，在B因素取某一水平的三次试验中，其它A、C、D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1-6

试验号 \ 因素	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。

将每一列的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，并把它的列成表1-7。这样就完成了试验数据的计算这一步。今后，就用这种表格化了的办法进行计算。

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均收率之间的差异小。所以根据极差R可定出因素的主次。极差大，对指标的影响大，为主要因素，极差小，对指标的影响小，为次要因素。

本例中，依极差定出因素的主次为

$$A—B—C$$

$$\text{主}\longrightarrow\text{次}$$

为了更直观起见，可用因素的水平作横坐标，平均收率作纵坐标，作出指标—因素关系图。对定量的因素，按照因素数据的大小顺序用折线把各点联系起来。对定性因素，例

催化剂等，则仅用虚竖直线表示每种水的平均收率。

本例指标—因素图见图 1-2。

（2）各因素取什么水平好呢？

表 1-7 试验数据与计算分析表

试验号＼因素（列号）	A 1	B 2	C 3	试验指标 转化率（%）
1	1（80℃）	1（90分）	1（5%）	31
2	1	2（120分）	2（6%）	54
3	1	3（150分）	3（7%）	38
4	2（85℃）	1	2	53
5	2	2	3	49
6	2	3	1	42
7	3（90℃）	1	3	57
8	3	2	1	62
9	3	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	

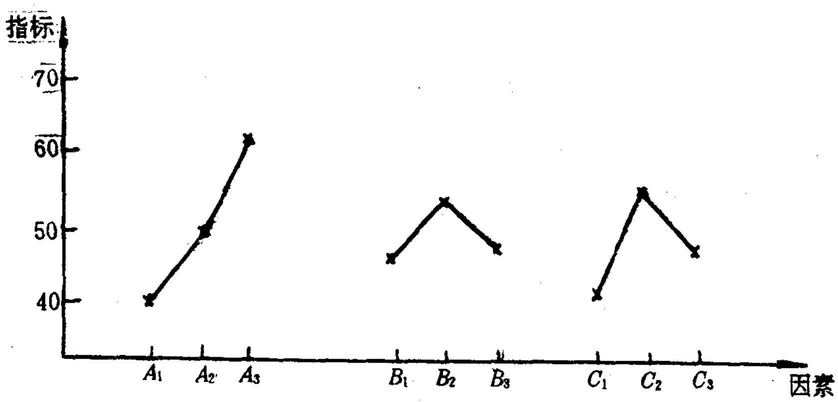


图 1-2 指标—因素图

选取因素的水平是与要求的指标有关的。要求的指标越大越好，则应该取使指标增大的水平，即各因素 k_1、k_2、k_3 中最大的那个水平。反之，如要求的指标越小越好，则取其中最小的那个水平。本例中，试验目的是提高转化率，所以应该挑选每个因素 k_1、k_2、k_3 最大的那个水平。即：

$$A_3B_2C_2$$

这也可以从图 1-2 上选出各因素图形中最高点的水平得到。

（3）什么是最优的生产条件

各因素的水平加在一起，是否为最优生产条件呢？从 k_1、k_2、k_3 的计算可看出，各因素选取的水平变动，指标波动的大小，实际上是不受其它因素的水平变动的影响的。所以把各因素的好水平简单地组合起来就是最优生产条件。

但是，实际上选取最优生产条件时，还要考虑因素的主次，以便在同样满足指标要求的情况下，对一些比较次要的因素按照优质、高产、低消耗的原则选取水平，得到更为结合生产实际要求的较好生产条件。

本例中，由于 B 为次要因素，为节省时间起见，也可取 B_1，即：$A_3B_1C_2$

需要指出的是，本例中得到的最优生产条件，$A_3B_2C_2$ 或 $A_3B_1C_2$，但我们还未弄清楚 $A_3B_2C_2$、$A_3B_1C_2$ 中哪个更好，而且这两个最优生产条件在已做的九次试验中未出现过，还必须经试验加以验证。为此，我们用 $A_3B_2C_2$、$A_3B_1C_2$ 各做一次验证试验，结果如下：

试验号	试验条件	收率（%）
1	$A_3B_2C_2$	74
2	$A_3B_1C_2$	75

最后确定最优生条件为 $A_3B_1C_2$。

下面再通过一个实例，归纳运用正交试验法，解决实际问题的一般步骤。

例 1-3　2，4—二硝基苯肼的工艺改革

试验目的：2，4—二硝苯肼是一种试剂产品。过去的工艺过程长，工作量大且产品经常不合格。北京化工厂改革了工艺，采用 2，—4—二硝基氯化苯（以下简称氯化苯）与水合肼在乙醇作溶剂的条件下合成的新工艺。小的试验已初步成功，但收率只有 45%，希望用正交试验法找出好的生产条件，达到提高生产效率的目的。

试验指标：产率（%）与外观颜色。

1．制定因素水平表

影响试验结果的因素是多样的。通过分析矛盾，决定本试验需考虑乙醇用量、水合肼用量、反应温度、反应时间、水合肼纯度和搅拌速度六种因素。对这六个要考虑的因素，现分别按具体情况选出要考虑比较的水平。

因素 A：乙醇用量

A_1＝200ml，A_2＝0ml（即中途不再加乙醇）。挑选这个因素与相应的水平，是为了考虑一下能否砍掉中途加乙醇这道工序？从而节约一些乙醇。

因素 B：水合肼用量

B_1＝理论量的 2 倍，B_2＝理论量的 1.2 倍。

水合肼的用量应超过理论量，但应超过多少，心中无数经过讨论，选用了 2 倍和 1.2 倍两个水平来试一试。

因素 C：反应温度

C_1＝回流温度，C_2＝60℃，（回流温度容易掌握，便于操作，但对反应是否有利呢？现与另一个 60℃跟它比较）。

因素 D：反应时间

D_1＝4 小时，D_2＝2 小时。

因素 E：水合肼纯度

E_1＝精品（浓度为 50%），E_2＝粗品（浓度为 20%）。